

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

Diogo Nardelli Siebert

**MODELOS CINÉTICOS DISCRETOS PARA FLUIDOS  
NÃO-IDEAIS COM TRANSIÇÃO DE FASES**

Florianópolis(SC)

2013



Diogo Nardelli Siebert

**MODELOS CINÉTICOS DISCRETOS PARA FLUIDOS  
NÃO-IDEAIS COM TRANSIÇÃO DE FASES**

Tese submetida ao Programa de Pós-  
Graduação em Engenharia Mecânica  
para a obtenção do Grau de Doutor  
em Engenharia Mecânica.  
Orientador: Paulo César Philippi, Dr.

Florianópolis(SC)

2013

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através  
do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC

Nardelli Siebert, Diogo

Modelos cinéticos discretos para fluidos não-ideais com transição de fases / Diogo Nardelli Siebert ; orientador, Paulo César Philippi - Florianópolis, SC, 2013.

151 p.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Inclui referências

1. Engenharia Mecânica. 2. transição de fases. 3. fluidos não-ideais. 4. interfaces líquido-vapor. I. Philippi, Paulo César. II. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica. III. Título.

Diogo Nardelli Siebert

**MODELOS CINÉTICOS DISCRETOS PARA FLUIDOS  
NÃO-IDEAIS COM TRANSIÇÃO DE FASES**

Esta Tese foi julgada aprovada para a obtenção do Título de “Doutor em Engenharia Mecânica”, e aprovada em sua forma final pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica.

Florianópolis(SC), 05 de Abril 2013.

---

Júlio César Passos, Dr.  
Coordenador

---

Paulo César Philippi, Dr.  
Orientador

**Banca Examinadora:**

---

Prof. Paulo César Philippi, Dr.  
Presidente

---

Prof. Felix Sharipov, Dr. - Relator  
Universidade Federal do Paraná



---

Prof. Aristeu da Silveira Neto, Dr.  
Universidade Federal de Uberlândia

---

Prof. Amir Antônio Martins de Oliveira Jr., Ph.D.  
Universidade Federal de Santa Catarina

---

Prof. Celso Peres Fernandes, Dr.Eng.  
Universidade Federal de Santa Catarina

---

Prof. Júlio César Passos, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

---

Prof. Luis Orlando Emerich dos Santos, Dr.Eng.  
Universidade Federal de Santa Catarina





## RESUMO

De forma distinta aos métodos de CFD convencionais, os métodos LB (Lattice-Boltzmann) baseados na discretização de equações cinéticas, historicamente denominadas de equações de Boltzmann, descrevem o comportamento dinâmico dos fluidos na escala mesoscópica. Na escala citada, fenômenos macroscópicos complexos, como o surgimento e colapso de interfaces, podem ser naturalmente descritos como associados a termos fontes incorporados às equações cinéticas. Utilizando esta característica do método LB, o presente trabalho propõe um novo método numérico para simulação de fluidos monocomponentes não-ideais, onde as fases líquida e vapor podem coexistir. O modelo cinético contínuo para este fluido tem como base a primeira equação da hierarquia BBGKY, na qual a repulsão a curta distância é representada pelo modelo de esferas rígidas de Enskog e a atração a longa distância é descrita utilizando um potencial médio. Por intermédio da análise multi-escala de Chapman-Enskog, demonstra-se que as equações de balanço de massa, quantidade de movimento e energia são compatíveis com aquelas do modelo da interface difusa. Objetivando a obtenção de um modelo mínimo, são realizadas simplificações nas equações cinéticas que não comprometem o comportamento macroscópico. O estudo de uma interface líquido-vapor em equilíbrio permite a derivação de expressões para o perfil de densidade na interface e para a tensão superficial, assim como comprova que o modelo contínuo recupera corretamente as densidades de saturação previstas pelas leis da termodinâmica. A forma discreta para a equação cinética é então obtida aplicando-se o método das abscissas prescritas em conjunto com uma nova forma discreta de terceira ordem para o termo advectivo da equação de Boltzmann. A validação numérica do método discreto é realizada por meio da medida da velocidade do som, da obtenção da curva de coexistência, da conferência da lei de Laplace assim como da relação teórica para a tensão superficial. Tais simulações são realizadas utilizando as equações de estado de Van der Waals, Redlich-Kwong, Redlich-Kwong-Soave, Peng-Robinson e Carnahan-Starling. Os resultados demonstram que a inconsistência termodinâmica apresentada por métodos anteriores é eliminada com a utilização do termo de advecção de terceira ordem. Por fim, o método é aplicado no estudo da coalescência entre duas gotas e no crescimento de bolhas em um meio líquido. Observa-se uma boa concordância com as correlações teóricas e dados experimentais disponíveis.

**Palavras-chave:** transição de fases. fluidos não-ideais. interfaces líquido-vapor.

## ABSTRACT

Unlike conventional CFD methods, the Lattice Boltzmann Method (LBM) describes the dynamic behavior of fluids in a mesoscopic scale using discrete forms of the kinetic equations. In this scale, complex macroscopic phenomena as the formation and collapse of interfaces can be naturally described as related to source terms incorporated into the kinetic equations. Based on this characteristic, a novel numerical method for the simulation of a single component multiphase flow is proposed. A continuum kinetic model for this fluid is obtained from the first equation of the BBGKY hierarchy using a short-range repulsion represented by the Enskog hard sphere model and long-range attraction described by a mean-field potential. Using the Chapman-Enskog multiscale analysis, it is shown that the mass, momentum and energy balance equations are compatible with those of the diffuse interface model. A minimal version of the model is then proposed by means of simplifications which do not affect the macroscopic behavior. The study of a flat liquid-vapor interface demonstrates that the continuum model recovers the saturation densities predicted by the laws of thermodynamics and expressions for the density profile and surface tension are derived. A discrete form of the kinetic equation is then obtained by applying the quadrature method based on prescribed abscissas together with a new third order scheme for the discretization of the advection term in the Boltzmann equation. The numerical validation of the method is performed by measuring the speed of sound, retrieving the coexistence curve and verifying both the Laplace's law and the theoretical expression for the surface tension. The simulations are performed with the equations of state of Van der Waals, Redlich-Kwong, Redlich-Kwong-Soave, Peng-Robinson and Carnahan-Starling. The results show that the thermodynamic consistency problem presented in earlier multiphase models are greatly reduced by using the third order discretization scheme for the advection term. Simulations of the coalescence process of drops and of the growth of a bubble in a liquid pool are, finally, presented with good agreement with available theoretical predictions and experimental data.

**Keywords:** phase change. non-ideal fluids. liquid-vapor interface.



## NOMENCLATURA

### Letras Gregas

$\beta$	Parâmetro Livre do modelo Lee-Fischer
$\gamma$	Tensão Superficial
$\Gamma_i$	Massa por unidade de área armazenada na interface
$\rho_c$	Massa específica no ponto crítico
$\delta$	Passo de tempo
$\epsilon$	Ângulo que relaciona a posição relativa das duas partículas antes da colisão.
$\eta$	Viscosidade Dinâmica
$\Theta$	Temperatura adimensional utilizada no LBM
$\kappa$	Parâmetro de interação / Momento de segunda ordem do potencial
$\lambda$	Segundo Coeficiente de Viscosidade
$\lambda_I$	Espessura da Interface
$\Lambda_s$	Termo de geração de entropia
$\mu$	Potencial Químico
$\xi_o$	Velocidade molecular adimensional
$\xi_{o,i}$	Velocidade molecular adimensional discreta
$\bar{\xi}$	Velocidade molecular pós-colisão
$\rho$	Massa específica
$\rho_r$	Massa específica na forma reduzida
$\varrho$	Massa específica adimensional utilizada nos métodos LB e LGA
$\sigma$	Raio da esfera de ação
$\bar{\tau}$	Tensor tensão viscosa

$\tau$	Tempo de Relaxação
$\chi_i$	Força resultante sobre a partícula $i$
$\chi$	Função correlação ou Função distribuição radial
$\Psi$	Função massa efetiva do modelo Shan-Chen
$\Psi$	Função massa efetiva do modelo Shan-Chen
$\psi$	Energia livre de Helmholtz por unidade de volume
$\psi_0$	Energia livre de Helmholtz por unidade de volume para um sistema homogêneo
$\Omega$	Operador de Colisão
$\Omega_b$	Operador de colisão de Boltzmann
$\Omega_i$	Operador de colisão discreto
$\omega_i$	Peso da quadratura relacionada à velocidade $\mathbf{c}_i$
$\Omega_l$	Termo de interação de longa distância do operador de colisão
$\Omega_s$	Termo de interação de curta distância do operador de colisão

### **Letras Romanas**

$a$	Fator de escala
$b$	Volume específico de uma partícula do gás
$\mathbf{c}_i$	Velocidade discreta adimensional utilizada no LGA e LBM
$c_s$	Velocidade do Som
$D$	Número de Dimensões
$D_t$	Derivada Advectiva
$\bar{\bar{\mathbf{E}}}^{(n)}$	Tensor isotrópico de ordem $n$
$e$	Energia interna por unidade de massa
$e_0$	Energia Interna de um sistema homogêneo
$\hat{f}$	Função distribuição modificada de segunda ordem
$f$	Função distribuição mássica

$f_i$	Função distribuição discreta
$f_i^{eq}$	Função distribuição de equilíbrio discreta
$F_N$	Função densidade de probabilidade de $N$ partículas
$F_R$	Função densidade de Probabilidade reduzida
$\mathbf{g}$	Aceleração devido a força externa
$G$	Parâmetro de interação do modelo Shan-Chen
$\mathcal{H}_{r_n}^{(n)}$	Polinômio de Hermite de ordem $n$ e conjunto de índices $r_n$
$h$	Distância entre sítios adjacentes
$h$	Entalpia específica ou entalpia por unidade de massa
$\bar{\mathbf{I}}$	Tensor Identidade
$\hat{\mathbf{k}}$	Versor que indica a direção relativa entre duas partículas antes da colisão
$k$	Condutividade Térmica
$k_x$	Número de Onda
$\dot{m}$	Vazão mássica
$m$	Massa da Partícula
$\hat{\mathbf{n}}$	Vetor Normal
$n_i$	Variável booleana que representa a ocupação de um sítio no LGA
$p$	Pressão Termodinâmica
$p_r$	Pressão na forma reduzida
$p_{eq}$	Pressão de Saturação
$\mathbf{q}$	Vetor fluxo de Calor
$\mathbf{q}_s$	Vetor fluxo difusivo de entropia
$R$	Constante do gás
$r$	Parâmetro de impacto

$\mathcal{S}$	Área da região junto a interface
$s$	Entropia por unidade de massa
$\bar{\bar{T}}$	Tensor tensão
$\hat{t}$	Versor tangente à superfície entre as fases
$T$	Temperatura
$T_c$	Temperatura no ponto crítico
$T_o$	Temperatura de referência
$T_r$	Temperatura na forma reduzida
$\boldsymbol{u}$	Velocidade adimensional utilizada nos métodos LB e LGA, comumente denominada de velocidade em unidades de rede
$\boldsymbol{v}$	Velocidade macroscópica do fluido
$\boldsymbol{v}_i$	Velocidade da interface
$\mathcal{V}$	Volume da região junto a interface
$V$	Potencial Intermolecular por unidade de massa
$\boldsymbol{x}_i$	Posição da partícula $i$



## SUMÁRIO

<b>1 INTRODUÇÃO</b>	17
<b>2 DESCRIÇÃO MACROSCÓPICA DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS</b>	21
2.1 EQUAÇÕES DA TERMO-HIDRODINÂMICA	21
2.2 MODELO DA INTERFACE SINGULAR	23
2.2.1 Casos específicos e Simplificações das Condições de Contorno	26
2.2.2 Limitações do modelo	28
2.3 MODELO DA INTERFACE DIFUSA	29
<b>3 FUNDAMENTOS DA TEORIA CINÉTICA</b>	35
3.1 FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO E EQUAÇÃO DE LIOUVILLE	36
3.2 HIERARQUIA BBGKY	37
3.3 EQUAÇÃO DE BOLTZMANN	38
3.3.1 Propriedades da Colisão e Distribuição de Equilíbrio	41
3.3.2 Limite Macroscópico	42
3.3.3 Modelos de colisão	42
3.4 EQUAÇÃO DE ENSKOG	43
<b>4 EQUAÇÃO LB</b>	47
4.1 MODELOS DE GÁS EM REDE	47
4.2 ORIGEM DA EQUAÇÃO LB	50
4.3 CONEXÃO COM A TEORIA CINÉTICA	53
4.3.1 Termo Advectivo	54
4.3.2 Espaço de velocidades e função distribuição	56
4.3.2.1 Redes e distribuições de equilíbrio	60
<b>5 REVISÃO DOS MODELOS MULTIFÁSICOS</b>	63
5.1 MODELO SHAN-CHEN	63
5.1.1 Modificações do Modelo Shan-Chen	67
5.2 MODELO SWIFT-ORLANDINI	69
5.3 MODELO DE LEE & FISCHER	71
<b>6 MODELO PROPOSTO</b>	75
6.1 MODELO CINÉTICO COMPLETO	75
6.2 ANÁLISE MULTI-ESCALA	79
6.2.1 Análise do Modelo Completo	83
6.2.1.1 Balanço de Massa	85
6.2.1.2 Balanço da Quantidade de Movimento	85
6.2.1.3 Balanço da Energia Interna	86

6.3	MODELO ISOTÉRMICO SIMPLIFICADO .....	88
6.4	MODELO TÉRMICO SIMPLIFICADO .....	89
6.5	COMPORTAMENTO DA INTERFACE .....	91
6.6	FORMA DISCRETA DOS MODELOS SIMPLIFICADOS .....	96
6.6.1	Forma discreta do termo advectivo .....	96
6.6.2	Forma discreta no espaço de velocidades .....	98
6.6.3	Forma discreta dos operadores diferenciais .....	101
7	RESULTADOS .....	103
7.1	VELOCIDADE DO SOM .....	104
7.1.1	Solução Analítica .....	104
7.1.2	Resultados Numéricos .....	106
7.2	CURVA DE COEXISTÊNCIA E PERFIL DE MASSA ESPECÍFICA .....	109
7.3	LEI DE LAPLACE E TENSÃO SUPERFICIAL .....	113
7.4	CORRENTES ESPÚRIAS .....	116
7.5	COALESCÊNCIA DE GOTAS .....	121
7.6	CRESCIMENTO DE BOLHA EM MEIO LÍQUIDO .....	123
8	CONCLUSÃO .....	125
	Referências Bibliográficas .....	127
	APÊNDICE A – Polinômios de Hermite .....	137
	APÊNDICE B – Redes .....	141
	APÊNDICE C – Equações de Estado .....	145
	APÊNDICE D – Lista de Publicações .....	149

## 1 INTRODUÇÃO

O estudo de fluidos multifásicos assim como o de escoamentos onde ocorrem transições de fase são de grande interesse tanto do ponto de vista científico quanto tecnológico. Entre os exemplos mais comuns de aplicações tecnológicas que envolvem esta área da mecânica dos fluidos estão o desenvolvimento de trocadores de calor e de sistemas de refrigeração, a recuperação de petróleo em rochas reservatório<sup>[1]</sup>, o projeto de usinas nucleares<sup>[2]</sup> e a criação de dispositivos microfluidos<sup>[3]</sup> (*microfluidics*). Na área científica, escoamentos multifásicos são encontrados em problemas que vão desde a obtenção da distribuição do tamanho de gotas da chuva na meteorologia<sup>[4]</sup> até o estudo do mecanismo de hidratação de animais na biologia<sup>[5]</sup>.

Porém, a descrição de escoamentos multifásicos encontra-se entre as áreas de maior complexidade da mecânica dos fluidos, tanto sob o aspecto físico quanto computacional. Esta dificuldade provém principalmente da dinâmica da interface, uma vez que esta sofre mudanças em sua topologia durante a evolução do escoamento, podendo ser criada ou destruída no decorrer de tal evolução.

O rápido avanço na capacidade de processamento e armazenamento computacional transformou o uso da computação em uma constante na área da mecânica dos fluidos. As mais conhecidas e utilizadas dentre as ferramentas de mecânica dos fluidos computacional (CDF) são aquelas que utilizam métodos numéricos para solução das equações macroscópicas de Navier-Stokes, como os métodos de volumes finitos, elementos finitos e diferenças finitas. Porém, a aplicação desta abordagem a problemas multifásicos resulta em diversas dificuldades relacionadas à complexa dinâmica da interface, assim como à transição de fase que ocorre nesta superfície.

Criado no início da década de 90, o método de Boltzmann para redes ou método *Lattice-Boltzmann* (LB) tem se mostrado bastante promissor na simulação de escoamentos complexos, possuindo uma série de vantagens em relação aos métodos CFD convencionais na descrição de escoamentos imiscíveis<sup>[6]</sup>. Tais resultados se devem à representação mesoscópica utilizada em LB, sendo esta uma escala intermediária entre a descrição microscópica, onde a posição e velocidade de todas as moléculas do fluido são conhecidas, e a macroscópica, a qual utiliza a hipótese do contínuo e descreve o fluido por meio dos campos de massa específica, velocidade e temperatura.

Embora com relativo sucesso na área, grande parte dos modelos

multifásicos existentes em LB não possuem conexão direta com a teoria cinética, sendo a descrição numérica a nível mesoscópico livremente ajustada com o objetivo de recuperar o comportamento macroscópico desejado, o que resulta em equações de estado artificiais, na inconsistência com as leis da termodinâmica e na quebra da invariância galileana. Tal abordagem foi comumente utilizada em LB, uma vez que a conexão detalhada entre o método e a teoria cinética foi estabelecida apenas recentemente<sup>[7, 8]</sup>. Adicionalmente, somente na última década foi elaborada uma descrição mesoscópica simples e consistente para fluidos não-ideais<sup>[9]</sup> que possibilita a elaboração de métodos computacionais.

Dentro deste contexto, o presente trabalho alia o procedimento de obtenção de formas discretas das equações da teoria cinética com a descrição mesoscópica citada, propondo assim um novo modelo LB para a descrição de fluidos não-ideais que apresentam transição de fase. A proposta origina-se de uma descrição baseada na equação de primeira ordem da hierarquia BBGKY, na qual o termo de interação é separado em curta e longa distância, sendo estes aproximados, respectivamente, pelo operador de colisão da equação de Enskog e por um potencial médio. Como trabalhos recentes<sup>[10]</sup> demonstram que a forma atual do método LB é insuficiente para descrever tal equação cinética, uma nova forma discreta para o termo advectivo é proposta, o que em conjunto com o método das abscissas prescritas proposta por Philippi et al.<sup>[7]</sup> resulta em um novo método computacional.

De maneira a apresentar o desenvolvimento do modelo e seus resultados, o presente documento está organizado da seguinte forma. Inicialmente, no Capítulo 2 realiza-se uma revisão sobre escoamentos multifásicos do ponto de vista macroscópico, abordando-se tanto o modelo convencional, no qual a interface é descrita como uma condição de contorno, quanto o modelo da interface difusa, que representa a interface como uma região de variação contínua da massa específica. O Capítulo 3 foca a representação mesoscópica do fluido, apresentando os fundamentos da teoria cinética, no qual as equações de Boltzmann, Enskog e a hierarquia BBGKY são expostas e discutidas. As origens, estrutura e fundamentação teórica do método LB são abordadas no Capítulo 4, dando especial ênfase a conexão deste método com a teoria cinética. Em sequência, o Capítulo 5 discute os principais modelos multifásicos que fazem uso da estrutura LB, focando principalmente nos pontos fortes e limitações de cada equação. A derivação do modelo mesoscópico para fluidos não-ideais é exposta no Capítulo 6. Este capítulo apresenta também a análise multiescala da equação cinética e discute simplificações que não afetam o comportamento macroscópico do esco-

amento nas primeiras ordens do número de Knudsen. Por meio destes modelos simplificados, a forma discreta é então obtida. No capítulo 7, a equação LB proposta é então validada por intermédio de simulações que visam demonstrar a incorporação da equação de estado, a consistência termodinâmica e a validade da equação de Young-Laplace. Neste mesmo capítulo, o método é utilizado na simulação dos problemas de coalescência entre gotas e do crescimento de uma bolha em um meio líquido a baixa pressão. Por fim, o Capítulo 8 resume as principais conclusões do trabalho, apresentando também as possíveis extensões do modelo assim como indicando procedimentos que contornem as suas limitações.



## 2 DESCRIÇÃO MACROSCÓPICA DE ESCOAMENTOS MULTIFÁSICOS

Como mencionado anteriormente, a descrição do escoamento com duas ou mais fases distintas é bastante complexo. Isto ocorre principalmente em virtude da dinâmica da interface localizada entre as diversas fases, assim como da transferência de quantidade de movimento e energia que ocorre por meio desta superfície. Neste capítulo, é abordado o tratamento matemático em escala macroscópica para esta classe de escoamentos.

Primeiramente, são apresentadas, de forma sucinta, as equações que descrevem a dinâmica de um fluido newtoniano composto de uma única fase. Com base nestas equações, são discutidas as extensões que permitem descrever o comportamento de escoamentos multifásicos através dos modelos da interface singular e da interface difusa.

### 2.1 EQUAÇÕES DA TERMO-HIDRODINÂMICA

Sob uma ótica macroscópica, o estado de um fluido é caracterizado através dos campos contínuos de massa específica ( $\rho$ ), velocidade ( $\mathbf{v}$ ) e temperatura ( $T$ ), sendo desnecessário inferir diretamente sobre a estrutura molecular do mesmo. A influência dessa estrutura microscópica é observada somente de forma indireta, através dos valores dos coeficientes de transporte como a viscosidade e a difusividade térmica.

As equações que determinam tais campos são obtidas por intermédio da aplicação dos balanços de massa, quantidade de movimento e energia<sup>[11, 12]</sup> em um volume material de fluido. Como resultado deste balanço, uma variação destas quantidades no interior do volume só pode ocorrer por meio de um fluxo difusivo pelas fronteiras do volume ou em decorrência de uma geração interna.

Do balanço de massa aplicado a um volume material de fluido, conforme descrito no parágrafo anterior, obtém-se a equação da continuidade ou equação da conservação da massa,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (2.1)$$

A aplicação do procedimento citado à quantidade de movimento leva à equação

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = \nabla \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}} + \rho \mathbf{g} \quad (2.2)$$

onde  $\bar{\bar{\mathbf{T}}}$  é o tensor tensão e  $\mathbf{g}$  é o campo de aceleração resultante da presença de uma força externa. O tensor tensão representa a força por unidade de área realizada pelos elementos de fluidos adjacentes. Do ponto de vista microscópico, este tensor está relacionado com o fluxo difusivo de quantidade de movimento proveniente do movimento das partículas que compõem o fluido. Logo, uma expressão para este tensor em termos das variáveis  $\rho$ ,  $\mathbf{v}$  e  $T$  demanda o conhecimento da estrutura microscópica, ou, alternativamente, a utilização de relações empíricas. Quando o fluido é newtoniano, o tensor fluxo de quantidade de movimento, ou tensor tensão, é a soma do tensor pressão com o tensor tensão viscosa, sendo que este último é diretamente proporcional ao tensor taxa de deformação. Ao utilizar esta premissa, chega-se à expressão

$$\bar{\bar{\mathbf{T}}} = -p\bar{\bar{\mathbf{I}}} + \left[ \eta (\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v}) - \lambda (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\bar{\mathbf{I}}} \right], \quad (2.3)$$

onde a constante de proporcionalidade  $\eta$  é a viscosidade dinâmica,  $\bar{\bar{\mathbf{I}}}$  é o tensor identidade,  $p$  é a pressão termodinâmica e  $\lambda$  é o segundo coeficiente de viscosidade, o qual em geral é aproximado por  $\lambda = \frac{2}{D}\eta$ .

Se é razoável assumir que a temperatura permanece constante no problema a ser estudado, então as Eqs (2.1) e (2.2) em conjunto com a equação de estado (EOS) do fluido formam um sistema fechado para a determinação das variáveis  $\rho$  e  $\mathbf{v}$ . Entretanto, se o campo de temperatura também é uma incógnita do problema, torna-se necessária a adição da equação de balanço de energia ao conjunto de equações,

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho e \mathbf{v}) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + \bar{\bar{\mathbf{T}}} : \nabla \mathbf{v}, \quad (2.4)$$

sendo  $e \equiv e(\rho, T)$  a energia interna por unidade de massa e  $\mathbf{q}$  o vetor fluxo de calor. De modo análogo ao tensor tensão, uma relação para o vetor  $\mathbf{q}$  requer o conhecimento do fluxo microscópico de energia ou a aplicação de uma relação constitutiva. Em geral, na ausência de radiação térmica utiliza-se para este fim a lei de Fourier, que propõe que o vetor fluxo de calor é diretamente proporcional ao gradiente de temperatura, *i.e.*,

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (2.5)$$



na qual  $k$  é a condutividade térmica.

Deste modo, as Eqs. (2.1) , (2.2) e (2.4), em conjunto com a equação de estado e com as relações constitutivas encontradas nas Eqs. (2.3) e (2.5), formam um sistema fechado para determinação dos campos de massa específica, velocidade e temperatura. Como a solução analítica exata deste conjunto de equações não é possível para a grande maioria dos problemas, torna-se então necessária a utilização de métodos numéricos. Dentre os métodos numéricos utilizados na solução destas equações destacam-se os métodos de elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos<sup>[11]</sup>. Enfatiza-se aqui que o método LB não consiste em uma forma discreta das equações da termo-hidrodinâmica, mas sim das equações da teoria cinética.

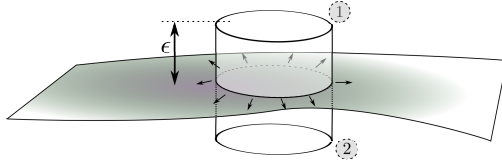
## 2.2 MODELO DA INTERFACE SINGULAR

Em um caso que envolva o escoamento de duas ou mais fases, tem-se um problema adicional relacionado à dinâmica da interface e à transferência de massa, energia e quantidade de movimento que acontecem nesta região. A abordagem comumente utilizada é assumir que a interface entre as duas fases pode ser modelada por meio de uma superfície de descontinuidade, ou seja, a região de transição não possui espessura. Este modelo é conhecido como modelo da interface singular ou modelo de Gibbs para a Interface.

Do ponto de vista microscópico, experimento e teoria demonstram que na realidade a interface entre dois fluidos constitui uma região fina onde a massa específica varia de forma contínua<sup>[2]</sup>. Porém, esta zona de transição possui um comprimento típico da ordem de dezenas de Angströms<sup>[13]</sup>. Consequentemente, o comprimento da interface será  $10^6$  vezes menor que o diâmetro característico de uma bolha ou uma gota, o que torna razoável considerar a interface como uma superfície de descontinuidade.

Matematicamente, o modelo da interface singular atribui domínios distintos a cada fase, nos quais as equações da termo-hidrodinâmica são aplicadas utilizando os respectivos coeficientes de transporte. A interface terá o papel de relacionar as variáveis nos diferentes domínios através das condições nos contornos de cada domínio. Para obtenção destas condições, o modelo emprega a hipótese que a interface está sujeita a uma tensão denominada de tensão superficial e denotada por  $\gamma$ . Esta grandeza é usualmente definida como a força por unidade de comprimento realizada pela interface na direção tangencial a superfície.

Alternativamente, o valor de  $\gamma$  pode ser interpretado como a energia por unidade de área armazenada na superfície entre as fases.



**Figura 1:** Volume de controle junto à interface

Assim como as equações da termo-hidrodinâmica, as condições de contorno na interface são obtidas através do balanço das grandezas macroscópicas em um volume junto a região interfacial, representado na Figura 1, conjuntamente com a definição da tensão superficial.

Denotando a velocidade da interface e o vetor normal à superfície do volume respectivamente por  $\mathbf{v}_i$  e  $\hat{\mathbf{n}}$ , o balanço de massa sobre o volume  $\mathcal{V}$  resulta na relação

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} \rho dV = - \oint_{\mathcal{S}} \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS, \quad (2.6)$$

na qual  $\mathcal{S}$  é a superfície do volume. A expressão anterior foi obtida considerando-se que não há massa acumulada na interface<sup>1</sup>. No limite em que a altura  $\epsilon$  do volume se aproxima de zero, o lado esquerdo da expressão anterior torna-se nulo e a Eq. (2.6) se restringe as integrais de superfície, que fornecem então a condição de contorno

$$\rho_1(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\mathbf{n}} = \rho_2(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\mathbf{n}} \equiv \dot{m}. \quad (2.7)$$

Conforme ilustrado na Figura. 1, os índices 1 e 2 encontrados na velocidade e massa específica indicam o lado da interface em que a variável é avaliada. Logo, a relação anterior expressa que a vazão mássica  $\dot{m}$  deve ser igual em ambos os lados da interface.

Na aplicação do balanço da quantidade de movimento ao volume da Figura. 1, nota-se que além de considerar o fluxo advectivo desta quantidade nas fronteiras do volume, é necessário adicionar a variação de quantidade de movimento resultante da atuação de forças sobre o volume. Sobre esse volume de controle, identifica-se forças oriundas do:

<sup>1</sup>A massa por unidade de área acumulada na interface  $\Gamma_i$  depende da escolha da posição da interface o que pode ser constatado a partir do modelo da interface difusa. Em geral defini-se esta posição como aquela em que  $\Gamma_i = 0$ .

- Campo de tensão do fluido,  $\bar{\bar{\mathbf{T}}} \cdot \hat{\mathbf{n}}$ ;
- Tensão superficial,  $\gamma \hat{\mathbf{t}}$ , onde  $\hat{\mathbf{t}}$  é um vetor unitário tangente a superfície entre as duas fases e perpendicular a linha de contato entre o volume e a interface;
- Campo conservativo  $\rho \mathbf{g}$ .

Ao utilizar as considerações expostas acima, o balanço da quantidade de movimento para o volume de interesse assume a forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho \mathbf{v} dV = & - \oint_S \rho \mathbf{v} (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \\ & + \oint_S \bar{\bar{\mathbf{T}}} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS + \oint_C \gamma \hat{\mathbf{t}} dl + \int_V \rho \mathbf{g} dV \end{aligned} \quad (2.8)$$

A integral de linha contida no terceiro termo do lado direito desta equação computa a força total realizada pela interface sobre o volume de fluido, onde  $C$  indica a região de contato entre o volume e a interface. Este termo pode ser reescrito como uma integral de superfície, para tanto, emprega-se o Teorema de Stokes juntamente com algumas manipulações algébricas<sup>[14]</sup>, o que resulta em

$$\oint_C \gamma \hat{\mathbf{t}} dl = \oint_S [\nabla \gamma - (\gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}}] dS.$$

Quando a expressão anterior é substituída na Eq. (2.8) e o limite de  $\epsilon \rightarrow 0$  é aplicado, as integrais volumétricas se anulam e os termos remanescentes fornecem a igualdade,

$$\bar{\bar{\mathbf{T}}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} - \bar{\bar{\mathbf{T}}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} = \dot{m}(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) - (\gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}} + \nabla \gamma, \quad (2.9)$$

que pode ser interpretada como um balanço de forças na interface.

Analogamente, o balanço de energia na proximidade da interface leva a relação,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_V \rho \left( \frac{v^2}{2} + e \right) dV = & - \oint_S \rho \left( \frac{v^2}{2} + e \right) (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS - \oint \mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \\ & + \oint_S (\mathbf{v} \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}) \cdot \hat{\mathbf{n}} dS + \int_V \rho \mathbf{g} \cdot \mathbf{v} dV, \end{aligned} \quad (2.10)$$

que gera uma nova condição de contorno no limite em que a altura  $\epsilon$  do volume tende a zero,

$$\dot{m} \left[ \left( \frac{v_2^2}{2} + e_2 \right) - \left( \frac{v_1^2}{2} + e_1 \right) \right] = (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}} + (\mathbf{v}_2 \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}_2 - \mathbf{v}_1 \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}_1) \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.11)$$

### 2.2.1 Casos específicos e Simplificações das Condições de Contorno

O uso das condições de contorno descritas nas Eqs. (2.7), (2.9) e (2.11) não é suficiente para determinar os campos de massa específica, velocidade e temperatura, assim como a dinâmica da interface, caracterizada pela velocidade da interface  $\mathbf{v}_i$ <sup>[15]</sup>, em razão do elevado número de incógnitas. Portanto, torna-se necessário realizar algumas suposições adicionais acerca do comportamento da interface.

Na situação em que o escoamento não apresenta transição de fase ou quando este é composto por duas fases completamente imiscíveis, o fluxo de massa através da interface é nulo, ou seja,  $\dot{m} = 0$ . Ao aplicar esta premissa, a condição de contorno em (2.6), obtida do balanço de massa na interface, assume a forma

$$\mathbf{v}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} = \mathbf{v}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} = \mathbf{v}_i \cdot \hat{\mathbf{n}}. \quad (2.12)$$

Esta relação expressa a continuidade da componente normal da velocidade através da interface e também que a interface se moverá na direção normal com a mesma velocidade que o fluido. Adicionalmente, aplica-se a condição de não escorregamento na interface, o que impõe a continuidade da componente tangencial à interface, ou seja,

$$\mathbf{v}_1 - (\mathbf{v}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}} = \mathbf{v}_2 - (\mathbf{v}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{n}}.$$

Enfatiza-se que a condição anterior não pode ser obtida somente de pressupostos macroscópicos, mas é resultado da interação microscópica na interface e apoia-se em observações experimentais<sup>[15]</sup>. Com tal hipótese, tem-se que tanto a componente normal quanto a tangencial são contínuas, logo, a própria velocidade é contínua na interface.

Se a imposição de fluxo mássico nulo através da interface é empregada, a condição obtida do balanço da quantidade de movimento pode ser simplificada como

$$\bar{\bar{\mathbf{T}}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} - \bar{\bar{\mathbf{T}}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} = -(\gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{n}} + \nabla \gamma. \quad (2.13)$$

A relação anterior expressa que a tensão não é contínua na interface, mas sofre um salto cujo valor é descrito pelo lado direito da equação.

O comportamento da tensão na interface pode ser interpretado de maneira mais clara quando a relação de descontinuidade é decomposta nas direções normal e tangencial à interface. Como a tensão superficial  $\gamma$  é definida somente na interface, um gradiente desta grandeza deve ser tangente a esta superfície. Consequentemente, o produto escalar da equação anterior com o versor normal  $\hat{\mathbf{n}}$  resulta em

$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{n}} \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} = -\gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}.$$

O termo  $\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}$  é conhecido como a curvatura média da superfície que também pode ser calculado através da média dos inversos dos raios principais de curvatura. Deste modo, conclui-se que o salto na componente normal da tensão será conjuntamente proporcional a curvatura da superfície e a tensão interfacial. Especificamente na situação em que o sistema se encontra em equilíbrio, a tensão resume-se à pressão termodinâmica, conforme Eq. (2.3), e a relação anterior assume a forma:

$$p_2 - p_1 = \gamma \nabla \cdot \hat{\mathbf{n}}, \quad (2.14)$$

também conhecida como equação de Young-Laplace.

De forma semelhante, o produto escalar da Eq. (2.13) com o versor  $\hat{\mathbf{t}}$  resulta em uma relação para o salto da componente tangencial,

$$\hat{\mathbf{t}} \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}_2 \cdot \hat{\mathbf{n}} - \hat{\mathbf{t}} \cdot \bar{\bar{\mathbf{T}}}_1 \cdot \hat{\mathbf{n}} = \nabla \gamma \cdot \hat{\mathbf{t}}. \quad (2.15)$$

Nota-se pelo lado direito da expressão anterior que uma descontinuidade na componente tangencial da tensão só ocorrerá quando houver um gradiente da tensão superficial. Esta força gerada por uma variação da tensão superficial ao longo da interface é denominada de efeito Marangoni, sendo que tal variação é ocasionada pela existência de gradientes de temperatura ou de concentração na interface.

Por fim, a condição de contorno para a transferência de energia através da interface, Eq. (2.11), pode ser simplificada desprezando-se os termos relativos ao trabalho devido às forças viscosas, ou seja,

$$\dot{m}(h_2 - h_1) = (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) \cdot \hat{\mathbf{n}}, \quad (2.16)$$

onde a energia interna específica foi escrita em termos da entalpia es-

pecífica  $h \equiv e + \frac{p}{\rho}$ . Se o valor das entalpias não difere sensivelmente dos seus valores na saturação, a diferença na entalpia entre as duas fases pode ser aproximada pela calor latente,  $\mathcal{L} = h_2^{\text{sat}} - h_1^{\text{sat}}$ . Com tal aproximação, a Eq. (2.16) expressa que há uma diferença entre o fluxo de calor que entra e que sai da interface, causada pela geração ou absorção de energia proveniente da transformação de fase que ocorre nesta superfície. No caso onde não há transição de fase, a condição na Eq. (2.16) impõe a continuidade do fluxo de calor.

### 2.2.2 Limitações do modelo

Seja na versão completa ou simplificada, as condições de contorno juntamente com as equações da termo-hidrodinâmica descrevem o comportamento dinâmico de um escoamento com múltiplas fases. Porém, esta descrição possui diversas limitações tanto do ponto de vista físico como numérico.

Ao descrever a interface como uma descontinuidade entre dois meios, opta-se por simplificar os processos que ali ocorrem. Esta hipótese é adequada para uma grande gama de situações onde o comprimento da região interfacial é várias ordens de grandeza menor do que o comprimento característico do problema. Entretanto, na proximidade do ponto crítico a espessura da interface pode assumir valores da ordem de magnitude deste comprimento característico, o que torna o modelo da interface singular inválido neste caso<sup>[13]</sup>.

Outra limitação nesta abordagem ocorre na descrição do processo de coalescência entre duas bolhas ou gotas. Isto ocorre pois na etapa inicial, ou seja, quando as gotas se tocam, uma singularidade surge no ponto de encontro entre as interfaces, o que caracteriza uma indefinição da curvatura. Tem-se também o desaparecimento de uma das interfaces, já que passa a existir uma única interface após a união, o que torna o tratamento matemático bastante difícil.

Similar à situação descrita no parágrafo anterior é a do surgimento de uma gota ou bolha, fenómeno chamado também de nucleação. Neste caso tem-se a criação de uma fase no interior de outra, o que acarreta o aparecimento de uma nova interface que por sua vez delimita um novo domínio.

Além dos aspectos físicos do modelo, há de se considerar também as restrições geradas pela aplicação de métodos numéricos à solução das equações, visto que a obtenção de resultados analíticos é possível apenas em um número restrito de casos. Quando a interface é descrita como

uma descontinuidade, divide-se o espaço em domínios distintos, um para cada fase, onde a solução é acoplada através da interface. Porém a interface é livre para se mover e deformar o que gera uma condição de contorno móvel. Logo o algoritmo numérico deve ser capaz de rastrear a posição da interface a cada passo de tempo, e impor as condições de contorno através de uma nova geração de malha ou de uma condição de contorno imersa. Tais abordagens geram um método bastante complexo e, em muitos casos, sem base matemática consistente<sup>[13]</sup>.

### 2.3 MODELO DA INTERFACE DIFUSA

Quando observada em escala apropriada, nota-se que a interface consiste em uma região onde a massa específica varia continuamente entre as fases líquida e vapor. O modelo da interface difusa considera esta natureza contínua, representando o escoamento líquido-vapor através de um único domínio, onde a influência da interface no comportamento dinâmico do escoamento ocorre através do surgimento de novos termos nas equações da termo-hidrodinâmica. Estas modificações nas relações macroscópicas são obtidas com base na análise do sistema em equilíbrio e na imposição da consistência termodinâmica das equações resultantes.

Em decorrência da característica não homogênea da interface, a descrição do estado de equilíbrio deste sistema físico requer uma extensão dos conceitos da termodinâmica, haja vista que o sistema não pode ser mais representado por um único valor da massa específica. Adicionalmente, é possível demonstrar que uma descrição termodinâmica limitada as variáveis locais resulta em uma tensão superficial nula<sup>[16]</sup>. Torna-se então necessário acrescentar uma dependência dos potenciais termodinâmicos com o gradiente da massa específica, que será denominado de termo não local.

Dentro deste contexto, Van de Waals<sup>[16]</sup> propôs uma abordagem onde a energia livre de Helmholtz por unidade de volume,  $\psi$ , é escrita como

$$\psi = \psi^0(\rho, T) + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2. \quad (2.17)$$

O termo  $\psi^0(\rho, T)$  representa a energia livre por unidade de volume de um sistema homogêneo de massa específica  $\rho$  e temperatura  $T$ . Já o segundo termo incorpora uma dependência da energia de Helmholtz com termos não locais, sendo  $\kappa$  um parâmetro relacionado com o potencial

intermolecular.

Com a adição desta nova variável na função  $\psi$ , o diferencial desta função passa a ser calculado através da relação

$$d\psi = \left( \frac{\partial \psi}{\partial T} \right)_{\rho} dT + \left( \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right)_T d\rho + \left[ \frac{\partial \psi}{\partial (\nabla \rho)} \right] \cdot d(\nabla \rho). \quad (2.18)$$

Reconhecendo a derivada no primeiro termo como a entropia por unidade de volume  $-\rho s$ , a derivada parcial com relação à massa específica como o potencial químico  $\mu$  e derivando explicitamente  $\psi$  em relação ao gradiente da massa específica, obtém-se a expressão

$$d\psi = -\rho s dT + \mu d\rho + \kappa \nabla \rho \cdot d(\nabla \rho). \quad (2.19)$$

Com o objetivo de obter uma expressão para a variação da energia interna, aplica-se a transformada de Legendre  $\psi = \rho e - \rho s T$  à relação anterior, o que resulta na diferencial,

$$\rho de = \rho T ds + (\rho \mu - \psi) \frac{d\rho}{\rho} + \kappa \nabla \rho \cdot d(\nabla \rho). \quad (2.20)$$

O segundo termo do lado direito da equação anterior pode ser reformulado em termos da pressão termodinâmica, o que pode ser constatado da definição dessa grandeza em função da energia livre de Helmholtz<sup>1</sup>

$$P = -\frac{\partial(\psi/\rho)}{\partial(1/\rho)} = \rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} - \psi = \rho \mu - \psi \quad (2.21)$$

onde  $\psi/\rho$  é a energia livre de Helmholtz por unidade de massa e  $1/\rho$  é o volume específico.

Utilizando a diferencial na Eq. (2.20), é possível obter uma relação para a derivada total no tempo, também conhecida como derivada material, da energia interna

$$\rho \frac{de}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \frac{P}{\rho} \frac{d\rho}{dt} + \kappa \nabla \rho \cdot \frac{d(\nabla \rho)}{dt}. \quad (2.22)$$

É importante observar que as Eq. (2.1), (2.2) e (2.4) continuam válidas neste caso, pois estas resultam apenas do balanço das grandezas macroscópicas sem imposições adicionais. Consequentemente, possíveis

---

<sup>1</sup>Neste trabalho denotar-se-á a pressão termodinâmica de um sistema não homogêneo por  $P$ , enquanto a pressão para um sistema homogêneo, que corresponde a equação de estado, será representada por  $p$ .



alterações no comportamento dinâmico ficam restritas à forma do tensor tensão e no fluxo de calor. A relação anterior pode ser utilizada para inferir a forma para  $\mathbf{q}$  e  $\bar{\bar{\mathbf{T}}}$  que resultem em equações termodinamicamente consistentes. Para tal fim, utiliza-se a relação para a variação da entropia dada por

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{q}_s + \Lambda_s, \quad (2.23)$$

que afirma que a variação da entropia em um volume material será resultado do balanço entre o fluxo de entropia difusiva pela fronteira do volume ( $\mathbf{q}_s$ ) e a geração de entropia no interior do volume ( $\Lambda_s$ ). Para que as equações obtidas estejam em consonância com a segunda lei da termodinâmica, ou seja, que a evolução no tempo leve a um sistema com entropia crescente, espera-se que o termo de geração de entropia  $\Lambda_s$  seja positivo.

A substituição tanto da Eq. (2.23), que descreve a evolução no tempo da entropia, quanto da equação para o balanço da energia interna em (2.22) resulta na seguinte expressão para geração de entropia,

$$-\nabla \cdot \mathbf{q} - \bar{\bar{\mathbf{T}}} : \nabla \mathbf{v} = -T \nabla \cdot \mathbf{q}_s + T \Lambda_s - P \nabla \cdot \mathbf{v} + \kappa \nabla \rho \cdot \frac{d(\nabla \rho)}{dt} \quad (2.24)$$

O último termo da equação anterior pode ser reescrito utilizando a definição de derivada material,

$$\kappa \nabla \rho \cdot \frac{d(\nabla \rho)}{dt} = \nabla \cdot \left[ \kappa \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right] - \frac{d\rho}{dt} \nabla \cdot (\kappa \nabla \rho) - \kappa \nabla \rho \nabla \rho : \nabla \mathbf{v} \quad (2.25)$$

Isolando o termo de geração na expressão (2.24) e substituindo a Eq. (2.25) para o termo não-homogêneo obtém-se a expressão final para  $\Lambda_s$

$$\begin{aligned} \Lambda_s = & \frac{1}{T} \left[ \bar{\bar{\mathbf{T}}} + (P - \kappa \rho \nabla^2 \rho) \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \kappa \nabla \rho \nabla \rho \right] : \nabla \mathbf{v} \\ & + \nabla \cdot \left[ \mathbf{q}_s - \frac{1}{T} \left( \mathbf{q} + \kappa \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right) \right] - \frac{1}{T^2} \left( \mathbf{q} + \kappa \nabla \rho \frac{d\rho}{dt} \right) \cdot \nabla T. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Uma das maneiras de restringir que o termo de geração seja sempre

positivo é escolhendo um fluxo de calor e um tensor tensão<sup>[13, 17, 18]</sup> que, ao ser substituído na equação anterior, resultem na mesma expressão de  $\Lambda_s$  encontrada para um fluido Newtoniano que obedece a Lei de Fourier. O uso desta abordagem resulta nas leis constitutivas

$$\bar{\bar{T}} = (-P + \kappa\rho\nabla^2\rho)\bar{\bar{I}} - \kappa\nabla\rho\nabla\rho + \bar{\bar{\tau}}, \quad (2.27)$$

$$\mathbf{q} = -\kappa\nabla\rho\frac{d\rho}{dt} - k\nabla T. \quad (2.28)$$

onde  $\bar{\bar{\tau}}$  é o tensor de tensão viscosa, cuja forma é encontrada no segundo termo da Eq. (2.3).

Vale notar que, apesar de existirem outras escolhas de  $\bar{\bar{T}}$  e  $\mathbf{q}$  que estejam de acordo com a segunda lei da termodinâmica, a relação acima constitui a alternativa mais simples que resulta nas relações constitutivas tradicionais longe da interface, ou seja, quando  $\kappa\nabla\rho$  pode ser desprezado. A dedução aqui realizada faz uso de uma abordagem puramente macroscópica, porém a forma apresentada para o fluxo de calor e tensor tensão estão em consonância com resultados obtidos a partir de pressupostos microscópicos. Utilizando como ponto de partida a equação de Lioville, é possível inferir que em fluidos constituídos de partículas que interagem a longa distância deverão existir termos adicionais no fluxo de calor e no tensor tensão<sup>[19]</sup>.

Da análise da Eq. (2.27), nota-se a presença de novos termos em relação à expressão para o tensor tensão encontrada na equação de Navier-Stokes. Em especial, tem-se a adição do termo não isotrópico

$$\bar{\bar{S}} = \kappa\nabla\rho\nabla\rho.$$

Este tensor foi originalmente postulado por Korteweg [Korteweg<sup>[20]</sup>, 1901 apud Anderson, McFadden e Wheeler<sup>[18]</sup>, 1998, p. 142] e por este motivo recebeu seu nome, sendo também conhecido como tensor de capilaridade. Ressalta-se também que a pressão  $P$  não se resume a pressão de um sistema homogêneo com uma massa específica  $\rho$ . Isto pode ser constatado substituindo a expressão para a energia livre de Helmholtz por unidade de volume, Eq. (2.19), na definição da pressão encontrada na Eq. (2.21),

$$P = \rho\frac{\partial\psi^0}{\partial\rho} - \psi^0 - \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2 = p - \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2,$$

na qual  $p$  é a pressão para um sistema homogêneo. Com esta constatação a tensão assume a forma final

$$\bar{\mathbf{T}} = \left[ -p + \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2 + \kappa\rho\nabla^2\rho \right] \bar{\mathbf{I}} - \kappa\nabla\rho\nabla\rho + \bar{\boldsymbol{\tau}}. \quad (2.29)$$

Conforme constata-se na Eq. (2.28), o fluxo de calor contém um termo adicional quando comparado a relação clássica da Lei de Fourier. Do ponto de vista microscópico, a interpretação física deste termo não corresponde a de um fluxo de energia térmica mas sim a de uma transferência de energia devido ao trabalho realizado pela força a longa distância[Dunn<sup>[21]</sup>, 1986 apud Anderson, McFadden e Wheeler<sup>[18]</sup>, 1998, pg. 146].

Uma compreensão mais clara acerca da influência dos termos não clássicos na dinâmica da energia interna e, consequentemente, da temperatura pode ser obtida quando a energia interna é reescrita como

$$\rho e = \psi + \rho s T = \psi^0 + \rho s_0 T + \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2 = \rho e_0 + \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2$$

onde  $e_0$  representa a energia interna por unidade de massa de um sistema homogêneo, ou seja, onde não é considerada a dependência com gradientes. Através da relação acima é possível obter que a derivada total no tempo da energia interna é dada por

$$\begin{aligned} \rho \frac{de}{dt} &= \rho \frac{de_0}{dt} - \frac{\kappa}{2\rho}(\nabla\rho)^2 \frac{d\rho}{dt} + \kappa(\nabla\rho) \cdot \frac{d(\nabla\rho)}{dt} \\ &= \rho \frac{de_0}{dt} - \frac{\kappa}{2}(\nabla\rho)^2(\nabla \cdot \mathbf{v}) + \nabla \cdot \left[ \kappa\nabla\rho \frac{d\rho}{dt} \right] \\ &\quad - \frac{d\rho}{dt} \nabla \cdot (\kappa\nabla\rho) - \kappa\nabla\rho\nabla\rho : \nabla\mathbf{v} \end{aligned} \quad (2.30)$$

sendo aplicada a relação obtida na Eq. (2.25). Utilizando esta relação na Eq. (2.10) que expressa o balanço de energia em um volume material, juntamente com as expressões para o tensor tensão e fluxo de calor, contidas respectivamente nas Eq. (2.29) e (2.28), resulta na igualdade

$$\rho \frac{de_0}{dt} = \nabla \cdot (k\nabla T) + (-p\bar{\mathbf{I}} + \bar{\boldsymbol{\tau}}) : \nabla\mathbf{v}, \quad (2.31)$$

Observa-se que a evolução no tempo da variável  $e_0$ , que é a energia interna sem considerar termos não-homogêneos, independe dos termos não clássicos. Na realidade a relação anterior é exatamente a forma

da equação clássica para a energia interna. Deste modo é possível concluir que os termos não clássicos não influenciam na evolução do campo de temperatura, o que por sua vez leva a interpretação de que o termo adicional no fluxo de calor, Eq (2.28), não representa um fluxo difusivo de energia térmica, mas consiste em um trabalho cuja atuação influencia somente os termos não homogêneos da energia interna.

A utilização do tensor tensão da Eq. (2.29) juntamente com a relação anterior para a energia possibilita descrever um sistema líquido-vapor<sup>[22]</sup> sem a necessidade da imposição de condições de contorno em fronteiras móveis ou da separação das fases em domínios distintos, o que torna seu uso bastante vantajoso em métodos numéricos.

### 3 FUNDAMENTOS DA TEORIA CINÉTICA

Na descrição de um sistema físico, seja em problemas puramente científicos ou de engenharia, almeja-se obter uma representação matemática para o sistema em questão, onde as grandezas do problema possam ser representadas quantitativamente. Em geral, tal representação pode ser realizada de diferentes formas, dependendo do nível de detalhe necessário. Para o problema da dinâmica de um fluido, esta descrição pode ser realizada em três níveis ou escalas distintas: a microscópica, a mesoscópica e a macroscópica.

Do ponto de vista microscópico, um fluido é composto por um grande número de partículas que interagem entre si. A descrição matemática nesta escala é realizada através da posição e velocidade de cada uma das partículas, sendo estas variáveis governadas pelas leis da mecânica. Quando analisada nesta escala, tanto a dinâmica da interface quanto o processo de transição de fase são fenômenos que ocorrem naturalmente como resultado das interações intermoleculares, o que permite observar tais fenômenos com grande riqueza de detalhe. Em contrapartida, a aplicação prática desta abordagem é bastante limitada, em virtude do elevado número de graus de liberdade, o que torna proibitiva a simulação computacional mesmo de problemas com comprimentos característicos da ordem do micrometro.

Conforme abordado no Capítulo 2, a representação macroscópica utiliza os campos de massa específica, velocidade e temperatura para caracterizar quantitativamente o fluido. Sob a ótica macroscópica, o fluido é tratado como um meio contínuo, sendo desnecessário inferir sobre sua estrutura molecular. Por este motivo, o número de variáveis é menor quando comparado com a abordagem microscópica. No entanto, parte da dinâmica do fluido é consequência direta do comportamento microscópico e não pode ser obtida somente de pressupostos macroscópicos, o que torna necessária a utilização de equações constitutivas para o cálculo dos fluxos difusivos, assim como o uso de hipóteses quanto ao comportamento da interface.

Entre a escala macroscópica, que representa o fluido como sendo contínuo, e a escala microscópica, que segue individualmente cada partícula, existe uma escala que pode ser considerada como intermediária. Essa escala, denominada mesoscópica, ainda considera o fluido como constituído por partículas, porém, ao invés de acompanhar a trajetória de cada partícula, leva em conta o comportamento microscópico apenas de forma probabilística. Consequentemente, esta abordagem se

beneficia de uma representação matemática reduzida, enquanto retém a característica de representar fenômenos complexos como consequência natural das interações intermoleculares.

Tendo em vista tais características da escala mesoscópica, este trabalho utilizou esta como base para a estruturação do modelo para escoamentos multifásicos. Assim, neste capítulo são apresentados os conceitos e equações básicas utilizadas na teoria cinética, já que esta contém o arcabouço teórico para descrição de fluidos nesta escala.

### 3.1 FUNÇÃO DISTRIBUIÇÃO E EQUAÇÃO DE LIOUVILLE

Na análise microscópica, um fluido pode ser considerado como sendo um sistema de  $N$  partículas que interagem entre si. A caracterização deste sistema é realizada através das posições  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$  e velocidades  $\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3, \dots, \boldsymbol{\xi}_N$  das  $N$  partículas, que devem ser conhecidas para todos os instantes de tempo.

Na teoria cinética, utiliza-se ainda a premissa de que o fluido é composto por partículas, porém opta-se por uma abordagem probabilística em detrimento da descrição das posições e velocidades em função do tempo. Em um contexto geral, a função que caracteriza o estado do sistema é a função densidade de probabilidade de  $N$  partículas  $F_N$ , onde a quantidade

$$F_N(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_N, t) d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_1 \dots d\boldsymbol{\xi}_N$$

representa a probabilidade do sistema se encontrar na região do espaço de fase com volume  $d\mathbf{x}_1 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_1 \dots d\boldsymbol{\xi}_N$  localizada no ponto  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_N$  no tempo  $t$ .

Pode-se mostrar a partir das leis da mecânica que a evolução dessa função ocorre segundo a equação de Liouville<sup>[23]</sup>,

$$\frac{\partial F_N}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial F_N}{\partial \mathbf{x}_i} \cdot \frac{\boldsymbol{\xi}_i}{m} + \frac{\partial F_N}{\partial \boldsymbol{\xi}_i} \cdot \boldsymbol{\chi}_i \right] = 0. \quad (3.1)$$

onde  $\boldsymbol{\chi}_i$  é a força resultante que atua sobre a  $i$ -ésima partícula e  $m$  é a massa da partícula<sup>[24]</sup>. Interpreta-se a equação de Liouville como a afirmação de que a probabilidade é constante ao longo de uma trajetória do sistema no espaço de fase.

A Eq. (3.1) fornece a base para a descrição probabilística do comportamento das partículas que compõem o fluido. Porém, assim

como ocorre na abordagem puramente microscópica, não é possível obter soluções desta equação para problemas realistas, uma vez que a função  $F_N$  possui  $6N + 1$  variáveis independentes. Contudo, é possível diminuir o número de variáveis por meio de uma série de simplificações e modificações que reduzem o grau de detalhe com que o sistema é descrito. Tais simplificações da equação de Liouville resultam nas diferentes equações da teoria cinética, dentre as quais destacam-se a equação de Boltzmann, a hierarquia BBGKY e a equação de Enskog.

### 3.2 HIERARQUIA BBGKY

Uma das formas de reduzir o grau de detalhe na descrição do sistema é diminuindo o número de variáveis na função distribuição. Com esta finalidade, define-se a função distribuição reduzida<sup>1</sup>

$$F_R(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_R, \boldsymbol{\xi}_1, \dots, \boldsymbol{\xi}_R, t) = \int F_N d\mathbf{x}_{R+1} \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_{R+1} \dots d\boldsymbol{\xi}_N. \quad (3.2)$$

O papel da integração é contrair a descrição de modo que  $F_R$  forneça a densidade de probabilidade de encontrar as  $R$  primeiras partículas em certas posições e velocidades, independente da posição e velocidade que se encontram as partículas de  $R + 1$  até  $N$ . No caso específico de  $R = 1$ ,

$$F_1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) = \int F_N d\mathbf{x}_2 \dots d\mathbf{x}_N d\boldsymbol{\xi}_2 \dots d\boldsymbol{\xi}_N.$$

Esta função é denominada de função distribuição para uma partícula e representa a densidade de probabilidade de encontrar a partícula 1 na posição  $\mathbf{x}_1$  com velocidade  $\boldsymbol{\xi}_1$  no tempo  $t$  independente da posição e velocidade das outras partículas.

De modo a obter uma equação que determine a evolução da função distribuição reduzida para  $R$  partículas, integra-se a equação de Liouville, Eq. (3.1), sobre as posições e velocidades das  $(N - R)$  últimas partículas. Aplicando o procedimento descrito no caso  $R = 1$  e assumindo que as partículas são idênticas obtém-se a equação para evolução da função distribuição de uma partícula,

---

<sup>1</sup>Quando não especificado os limites de integração, convencionou-se que a integral é realizada sobre todo o domínio das variáveis de integração

$$\frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial \mathbf{x}_1} \cdot \boldsymbol{\xi}_1 + \frac{\partial F_1}{\partial \boldsymbol{\xi}_1} \cdot \frac{\boldsymbol{\chi}_{1e}}{m} = -\frac{(N-1)}{m} \int \boldsymbol{\chi}_{12} \cdot \frac{\partial F_2}{\partial \boldsymbol{\xi}_1} d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2. \quad (3.3)$$

As forças  $\boldsymbol{\chi}_{1e}$  e  $\boldsymbol{\chi}_{12}$  indicam respectivamente, a força externa realizada sobre a partícula 1 e a força que a partícula 2 faz sobre a partícula 1

Nota-se que a equação anterior depende da função distribuição de probabilidade para duas partículas  $F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t)$ . Assim como a equação para  $F_1$  depende de  $F_2$ , de maneira geral a relação obtida através deste procedimento para  $F_R$  será dependente de  $F_{R+1}$ . Esta dependência gera um conjunto de equações, conhecido como hierarquia de equações BBGKY<sup>[23]</sup>.

Do ponto vista prático, a hierarquia BBGKY não representa um ganho real. Isto ocorre pois troca-se a descrição através de uma função de  $6N+1$  variáveis da equação de Liouville por um sistema de  $N$  equações diferenciais. Entretanto, empregando simplificações que permitam escrever a função de probabilidade conjunta  $F_2$  em termos da função  $F_1$ , é possível obter uma equação fechada para a função distribuição de uma partícula. Esta abordagem será utilizada posteriormente na derivação do modelo de transição de fase.

### 3.3 EQUAÇÃO DE BOLTZMANN

A primeira equação de evolução fechada para a função distribuição  $F_1(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$  foi proposta por Ludwig Boltzmann no século XIX. Ainda que esta equação possa ser derivada por outro meio, a dedução a partir da equação de Liouville permite analisar em maior detalhe os limites de aplicabilidade da equação de Boltzmann. Por se tratar de um procedimento onde as hipóteses e simplificações são evidentes, esta abordagem permite também observar os pontos que podem ser alterados na dedução de modo a expandir o limite de aplicabilidade da equação resultante.

Na dedução da equação de Boltzmann, as seguintes hipóteses são utilizadas:

- a massa específica do gás é suficientemente baixa, de modo que colisões envolvendo três partículas ou mais são altamente improváveis. Logo, somente colisões binárias são consideradas. Por outro lado, é necessário que o número de partículas  $N$  contidas no gás seja suficientemente grande para que a descrição probabilística seja válida;



- o potencial interação é de curto alcance. Pois mesmo em gases rarefeitos o conceito de colisão binária perde o sentido se o potencial tiver um alcance longo o suficiente, já que uma dada partícula interagiria com muitas outras em um dado instante;
- a hipótese do caos molecular é válida. Esta hipótese consiste em afirmar que antes de duas partículas colidirem, suas velocidades e posições não estão correlacionadas.

Tais hipóteses permitem considerar que a interação entre duas partículas está restrita a uma região de raio  $\sigma$  em torno da partícula, que é denominada de esfera de ação. Fora da esfera não há interação e, conseqüentemente, a força entre partículas  $\chi_{12}$  é nula quando  $|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2| > \sigma$ .

Como a esfera de ação possui um volume desprezível quando comparada ao volume total do gás, é razoável afirmar que a probabilidade de encontrar uma partícula dentro da esfera de ação de outra é negligenciável. Assim, ao realizar a contração da função distribuição de  $N$  partículas pode-se desprezar a região do espaço de fase onde as partículas estão separadas de uma distância inferior a  $\sigma$ , ou seja,

$$F_1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) = \int_{|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1| \geq \sigma} F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2.$$

É possível demonstrar que a utilização da aproximação anterior no processo de contração da Equação de Liouville faz com que o valor da função distribuição conjunta  $F_2$  seja necessário somente na superfície da esfera de ação.

A dependência da função  $F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t)$  pode ser completamente eliminada da equação por meio da hipótese do caos molecular. Na situação em que as velocidades das duas partículas  $\boldsymbol{\xi}_1$  e  $\boldsymbol{\xi}_2$  indicam uma situação pré-colisional, a hipótese afirma que as probabilidades não são correlacionadas, logo

$$F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) = F_1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) F_1(\mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_2, t).$$

Já na situação onde  $\boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, \mathbf{x}_1$  e  $\mathbf{x}_2$  especificam um estado pós-colisional, a não correlação das velocidades não pode ser utilizada. Para contornar esta situação, usa-se o princípio de que a probabilidade é constante em uma trajetória no espaço de fase. Através das leis da mecânica é possível obter as velocidades que as partículas devem possuir antes da colisão, denotadas de  $\bar{\boldsymbol{\xi}}_1$  e  $\bar{\boldsymbol{\xi}}_2$ , para que as velocidades finais sejam  $\boldsymbol{\xi}_1$  e  $\boldsymbol{\xi}_2$ . Esta constatação permite expressar a distribuição conjunta na forma

$$F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t) = F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \bar{\boldsymbol{\xi}}_1, \bar{\boldsymbol{\xi}}_2, t) = F_1(\mathbf{x}_1, \bar{\boldsymbol{\xi}}_1, t)F_1(\mathbf{x}_2, \bar{\boldsymbol{\xi}}_2, t).$$

Onde a função  $F_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \bar{\boldsymbol{\xi}}_1, \bar{\boldsymbol{\xi}}_2, t)$  foi escrita em termos da distribuição de probabilidade para uma partícula  $F_1$ , já que esta é calculada em um estado pré-colisional e, por hipótese, este não é correlacionado.

Com as hipóteses e simplificações expostas, a redução da equação de Liouville a uma única partícula resulta na celebrada equação de Boltzmann,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi}_1 \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}_1} = & \frac{1}{m} \int |\boldsymbol{\xi}_1 - \boldsymbol{\xi}| [f(\mathbf{x}_1, \bar{\boldsymbol{\xi}}_1, t)f(\mathbf{x}_1, \bar{\boldsymbol{\xi}}_2, t) \\ & - f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t)f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_2, t)] r dr d\epsilon d\boldsymbol{\xi}_2 \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde a função distribuição  $f$  é definida como,

$$f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) = (Nm)F_1(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t).$$

Se a hipótese ergódica é considerada verdadeira, esta nova função distribuição pode ser interpretada como a massa de partículas por unidade de volume do espaço de fase que se encontram na posição  $\mathbf{x}_1$  com velocidade  $\boldsymbol{\xi}_1$ . Valendo-se desta interpretação, é possível obter uma conexão simples com as variáveis macroscópicas por meio dos momentos desta distribuição,

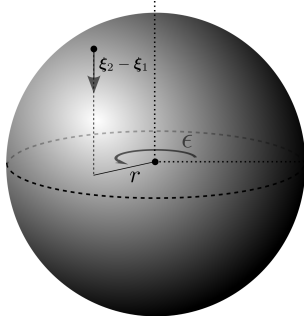
$$\rho = \int f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) d\boldsymbol{\xi}_1, \quad (3.5)$$

$$\rho \mathbf{v} = \int f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) \boldsymbol{\xi}_1 d\boldsymbol{\xi}_1, \quad (3.6)$$

$$\frac{D}{2} \rho RT = \frac{1}{2} \int f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t) |\boldsymbol{\xi}_1 - \mathbf{v}|^2 d\boldsymbol{\xi}_1. \quad (3.7)$$

na qual  $D$  é o número de dimensões e  $R$  é a constante do gás.

O lado direito da Eq. (3.4) é comumente denominado de operador de colisão, já que é este termo o responsável por descrever a ação da interação molecular. As variáveis de integração  $r$  e  $\epsilon$  correspondem respectivamente ao parâmetro de impacto e ao ângulo de entrada da colisão, conforme ilustrado na Figura 2. De modo simplificado, pode-se argumentar que esta integral percorre todas as possíveis configurações de uma colisão binária, calculando dessa maneira a taxa de variação



**Figura 2:** Ilustração da esfera de ação com as variáveis de integração utilizadas no operador de colisão.

da probabilidade provocada pelas colisões com as outras moléculas que constituem o gás.

A equação integro-diferencial obtida por Boltzmann é de difícil solução, em razão principalmente da forma complexa do operador de colisão. Consequentemente, a utilização desta equação fica restrita ao cálculo teórico dos coeficientes de transportes, como a viscosidade e a difusividade térmica, à derivação de equações macroscópicas e à solução de escoamentos em geometria simples, restrito em sua maioria a casos unidimensionais.

### 3.3.1 Propriedades da Colisão e Distribuição de Equilíbrio

O operador de colisão, cuja forma é dada pelo termo no lado direito da Eq. (3.4), tem o papel de modificar a distribuição  $f(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1, t)$  levando em consideração a interação entre as partículas. Se tal interação consiste em colisões elásticas, a atuação deste operador não deve alterar a massa, a quantidade de movimento e a energia locais, limitando-se a afetar a forma como estas quantidades são transferidas. Denotando o operador como  $\Omega[f]$ , estas afirmações podem ser representadas na forma de equações, respectivamente, como

$$\int \Omega[f] d\boldsymbol{\xi}_1 = 0, \quad (3.8)$$

$$\int \Omega[f] \xi_1 d\boldsymbol{\xi}_1 = 0, \quad (3.9)$$

$$\int \Omega[f] \frac{\xi_1^2}{2} d\xi_1 = 0. \quad (3.10)$$

De especial interesse é a forma que a função distribuição assume no equilíbrio, ou seja, quando  $\Omega[f] = 0$ . No caso do operador de colisão da equação de Boltzmann, é possível demonstrar que esta relação é satisfeita pela função

$$f^{eq}(\xi) = \rho \left( \frac{1}{2\pi RT} \right)^{D/2} e^{-\frac{(\xi - \mathbf{u})^2}{2RT}} \quad (3.11)$$

a qual é denominada de função distribuição de Maxwell-Boltzmann ou Maxwelliana.

### 3.3.2 Limite Macroscópico

Um dos aspectos mais importantes de um modelo cinético é o seu comportamento em nível macroscópico. Como comportamento em nível macroscópico entende-se a dinâmica das variáveis  $\rho$ ,  $\mathbf{u}$  e  $T$  no limite onde o comprimento do sistema é algumas ordens de grandeza maior que a distância média entre as partículas que constituem o gás.

A técnica mais utilizada para realizar a conexão entre as duas escalas é conhecida como análise de Chapman-Enskog<sup>[25]</sup>. Esta análise consiste em uma expansão da função distribuição e dos gradientes, sendo que esta é realizada para um estado próximo do equilíbrio local. A aplicação deste procedimento à equação de Boltzmann resulta nas equações de Navier-Stokes-Fourier, ou seja, até uma dada aproximação o gás se comporta como um fluido newtoniano que obedece a lei de Fourier.

Este procedimento será descrito em maior detalhe no Capítulo 6, onde a análise multiescala do modelo proposto é realizada.

### 3.3.3 Modelos de colisão

Com o intuito de simplificar o operador de colisão, e consequentemente a própria equação de Boltzmann, diversos autores propuseram versões alternativas para este termo. Dentre os modelos propostos na literatura, o operador BGK encontra-se entre os de forma mais simples. Este operador foi proposto em 1954 por Bhatnagar, Gross e Krook<sup>[26]</sup> e apresenta a forma

$$\Omega_{\text{BGK}} = \frac{1}{\tau} (f - f^{eq}). \quad (3.12)$$

Nota-se a partir da expressão anterior que quanto mais distante o fluido estiver do equilíbrio local maior será a taxa de variação da função distribuição devido às colisões. O termo  $1/\tau$  é interpretado como a frequência entre colisões, sendo  $\tau$  um parâmetro ajustável denominado tempo de relaxação.

O operador da Eq. (3.12) mantém as principais características do operador de colisão originalmente proposto por Boltzmann. Entre estas cita-se a conservação local da massa, da quantidade de movimento e da energia, assim como um equilíbrio descrito pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. Como consequência destas características, as equações macroscópicas resultantes deste modelo também possuem a forma das equações de Navier-Stokes-Fourier, sendo os coeficientes de transportes linearmente dependentes do tempo de relaxação. Como principal limitação deste modelo, tem-se que tanto a viscosidade  $\eta$  quanto a condutividade térmica  $k$  são proporcionais ao tempo de relaxação, o que impossibilita o ajuste independente destes coeficientes de transporte.

### 3.4 EQUAÇÃO DE ENSKOG

A aplicabilidade da equação de Boltzmann é limitada pelo conjunto de suposições realizadas ao derivá-la, ou seja, seu escopo de aplicação fica restrito a gases de baixa densidade, onde as hipóteses citadas anteriormente são válidas. A possibilidade de descrever sistemas densos utilizando uma versão generalizada da equação de Boltzmann foi alvo de grande interesse nas últimas décadas. Porém, apesar desses esforços, nenhuma solução geral foi ainda encontrada<sup>[23]</sup>.

Por este motivo, a equação proposta por Enskog em 1922 ainda é amplamente utilizada para descrição de gases densos. Enskog propôs modificar a equação de Boltzmann de modo a descrever um gás composto por esferas rígidas. Consequentemente, algumas das hipóteses realizadas anteriormente por Boltzmann precisaram ser abandonadas.

A primeira delas é o conceito de colisão localizada. Nota-se na Eq. (3.4) que todas as funções distribuições são avaliadas no ponto  $\mathbf{x}_1$ . Esta imposição é uma aproximação, onde as posições  $\mathbf{x}_2$ ,  $\bar{\mathbf{x}}_1$  e  $\bar{\mathbf{x}}_2$  sob a esfera de ação são substituídas pela posição  $\mathbf{x}_1$ , pois no limite em que raio de ação  $\sigma$  tende a zero todas as posições convergem para  $\mathbf{x}_1$ .

Esta suposição é aceitável para partículas pontuais, porém deixa de ser válida quando o gás é composto de esferas rígidas.

A segunda hipótese que precisa ser descartada é a do caos molecular. Em um gás denso composto por esferas rígidas, independentemente da situação ser pré ou pós-colisional, nem todo o volume do gás está acessível em decorrência da ocupação do espaço pelas outras partículas do gás. Logo, observa-se que haverá uma correlação entre as posições das partículas. Outro ponto que pode afetar a correlação entre as posições das partículas é o encobrimento. Este efeito ocorre quando duas partículas se encontram próximas de tal modo que estas servem de escudo parcial contra a colisão de uma terceira partícula, diminuindo assim a probabilidade de ocorrência de uma colisão.

Com o relaxamento das hipóteses empregadas anteriormente na derivação da equação de Boltzmann, torna-se necessária a incorporação do termo de correlação na distribuição de probabilidade conjunta. Com esta adição, obtém-se para a situação pré-colisional

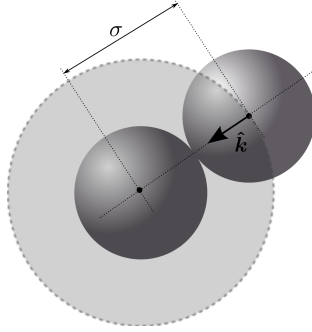
$$F^{(2)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_1, \boldsymbol{\xi}_2) = \chi \left( \mathbf{x}_1 - \frac{1}{2} \sigma \hat{\mathbf{k}} \right) F^{(1)}(\mathbf{x}_1, \boldsymbol{\xi}_1) F^{(1)}(\mathbf{x}_1 - \sigma \hat{\mathbf{k}}, \boldsymbol{\xi}_2).$$

Como ilustrado na Figura 3,  $\hat{\mathbf{k}}$  é um versor que aponta do centro da partícula 2 para o centro da partícula 1 e  $\sigma$  é o diâmetro da partícula, que neste caso coincide com o raio da esfera de ação. A função correlação  $\chi$ , também denominada de função distribuição radial, é avaliada no ponto de encontro, ou seja, no ponto médio entre as duas partículas. Uma primeira aproximação para a função correlação pode ser obtida do aumento da probabilidade de se encontrar a partícula em um dado ponto causada pela ocupação do espaço vizinho por outras partículas

$$\chi = \frac{1}{1 - \rho(4\pi\sigma^3)/(3m)} = \frac{1}{1 - b\rho},$$

onde  $b \equiv (4\pi\sigma^3)/(3m)$ , é o volume específico de uma molécula. Um fator de correlação que leve em consideração mais efeitos de interação entre as partículas pode ser obtido utilizando as técnicas da mecânica estatística<sup>[27]</sup>.

Realizando os mesmos procedimentos que levam à equação de Boltzmann conjuntamente com as modificações descritas acima, obtém-se uma nova forma para o operador de colisão,



**Figura 3:** Colisão de duas eferas rígidas conforme o modelo de Enskog

$$\Omega[f] = \frac{1}{m} \int |\xi_1 - \xi| \left[ \chi \left( \mathbf{x}_1 + \frac{\sigma}{2} \hat{\mathbf{k}} \right) f(\mathbf{x}_1, \bar{\xi}_1, t) f(\mathbf{x}_1 + \sigma \hat{\mathbf{k}}, \bar{\xi}_2, t) \right. \\ \left. - \chi \left( \mathbf{x}_1 - \frac{\sigma}{2} \hat{\mathbf{k}} \right) f(\mathbf{x}_1, \xi_1, t) f(\mathbf{x}_1 - \sigma \hat{\mathbf{k}}, \xi_2, t) \right] r dr d\epsilon d\xi_2,$$

sendo a equação que utiliza este operador denominada de Equação de Enskog. A exemplo do que ocorre com o operador de colisão obtido por Boltzmann, é necessária a simplificação da expressão anterior quando o objetivo é a aplicação a problemas realistas em mecânica dos fluidos. Isto pode ser alcançado através da expansão das funções  $f$  e  $\chi$  em série de Taylor ao redor do ponto  $\mathbf{x}_1$ , em conjunto com a suposição de que a função distribuição descreve um estado próximo do equilíbrio local. Estas hipóteses resultam no operador de colisão simplificado de Enskog,

$$\Omega[f] = \Omega_b[f] - b\rho\chi f^0 \left\{ (\xi - \mathbf{u}) \cdot \left[ \nabla \ln(\rho^2 \chi T) \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3}{5} \left( \frac{|\xi - \mathbf{u}|^2}{RT} - \frac{D+2}{2} \right) \nabla \ln T \right] \right. \\ \left. + \frac{2}{D+2} \left[ \frac{2}{RT} (\xi - \mathbf{u})(\xi - \mathbf{u}) : \nabla \mathbf{u} + \left( \frac{|\xi - \mathbf{u}|^2}{RT} - \frac{D+2}{2} \right) \nabla \cdot \mathbf{u} \right] \right\} \quad (3.13)$$

na qual  $\Omega_b$  representa o operador de colisão obtido por Boltzmann. A relação anterior constitui uma escolha mais adequada para representar

o efeito das interações de curta distância, visto que as hipóteses consideradas são menos restritivas que aquelas utilizadas por Boltzmann, tornando esta mais adequada à descrição de gases densos.



## 4 EQUAÇÃO LB

Neste capítulo, será realizada uma discussão dos conceitos e da estrutura básica do método de Boltzmann para redes ou método *Lattice Boltzmann* (LBM). É realizada, inicialmente, uma revisão das origens históricas do método, começando pela sua primeira derivação por meio dos modelos de gás em rede ou *Lattice Gas Automata* (LGA), passando então para os modelos com operador de colisão simplificado. Na segunda parte do capítulo são apresentadas as formulações mais recentes sobre o método, onde este é interpretado como uma forma discreta das equações da teoria cinética dos gases.

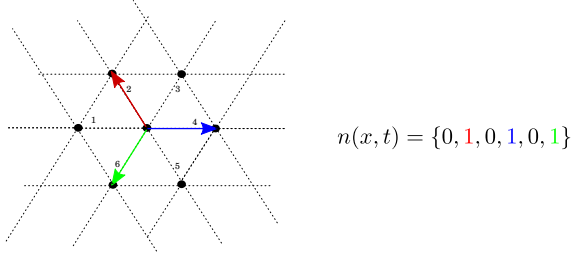
### 4.1 MODELOS DE GÁS EM REDE

Historicamente, o LBM surgiu através do aprimoramento de outro método numérico, o LGA ou, como também é conhecido, método booleano. Este por sua vez tem origem no artigo publicado em 1986 por Frisch, Hasslacher e Pomeau<sup>[28]</sup> que propôs um método baseado em autômatos celulares capaz de reproduzir o comportamento macroscópico de fluidos newtonianos.

A estrutura do modelo de gás em rede consiste em um mundo microscópico simplificado, onde as partículas que constituem o fluido estão limitadas a ocupar os vértices de uma rede regular, também conhecidos como sítios. A velocidade das partículas, denotada por  $\mathbf{c}_i$ , é restrita a um conjunto de  $b$  velocidades, sendo que o módulo e a direção destas são escolhidos de maneira que as partículas transladem até os sítios mais próximos em um passo de tempo.

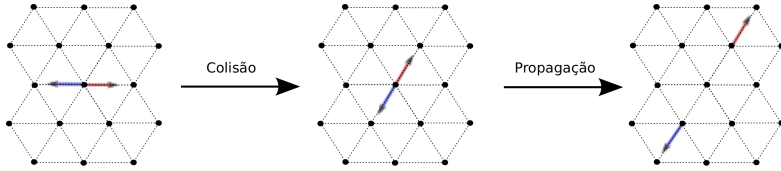
Se a ocupação de um determinado sítio é limitada a uma partícula por direção, o estado de cada sítio pode ser descrito através de um conjunto de variáveis booleanas  $n_i(\mathbf{x}, t)$ , a qual assume o valor 1 para a presença e 0 para a ausência de uma partícula com velocidade  $\mathbf{c}_i$  na posição  $\mathbf{x}$  no tempo  $t$ . O estado de um sítio para um gás em rede que utiliza um conjunto de velocidades de forma hexagonal é apresentado na Figura 4, juntamente com sua representação matemática.

A evolução do sistema é caracterizada por duas etapas distintas: a colisão e a propagação, como ilustrado na Figura 5. Na propagação, as partículas movem-se até os sítios vizinhos na direção de sua velocidade  $\mathbf{c}_i$ . Já na etapa de colisão, o estado sítio de cada sítio é alterado de



**Figura 4:** Modelo do gás em rede e representação da ocupação através de variáveis booleanas.

acordo com uma regra que conserva o número de partículas e a quantidade de movimento no sítio. Esta etapa tem como intuito simular a colisão das partículas neste mundo microscópico simplificado.



**Figura 5:** Etapas de colisão e propagação no método booleano em uma rede hexagonal.

No LGA utiliza-se, por simplicidade, a premissa de que as partículas tem massa unitária. Assim, a massa específica<sup>1</sup> pode ser identificada como o número de partículas no sítio,

$$\varrho = \sum_{i=0}^b n_i(\mathbf{x}, t), \quad (4.1)$$

<sup>1</sup>Neste trabalho adotou-se duas notações diferentes para as grandezas macroscópicas. Os símbolos  $\varrho$ ,  $\mathbf{u}$  e  $\Theta$  são utilizados, respectivamente, para representar a massa específica, velocidade, e temperatura nas versões adimensionais empregadas nos métodos LGA e LBM, comumente denominadas de variáveis em unidade de rede. Os símbolos  $\rho$ ,  $\mathbf{v}$  e  $T$  são utilizados para representar estas mesmas grandezas na forma dimensional.

e a velocidade pode ser obtida através da quantidade de movimento total no sítio,

$$\rho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^b n_i \mathbf{c}_i. \quad (4.2)$$

A utilização das relações anteriores e a repetida sucessão dos processos de colisão e propagação possibilitam determinar a evolução do campo de massa específica e velocidade do fluido.

A primeira dificuldade encontrada na utilização do LGA foi a obtenção de um comportamento macroscópico isotrópico. Este ponto negativo pode ser contornado através da escolha de um conjunto de velocidades  $\mathbf{c}_i$  cujos tensores calculados pela soma  $\sum_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \dots \mathbf{c}_i$  são isotrópicos até quarta ordem. Quando esta condição de isotropia é satisfeita, observa-se por meio de uma análise multiescala que a dinâmica do fluido segue em média a equação de Navier-Stokes para escoamentos incompressíveis.

O método LGA demonstrou ser uma ferramenta útil no estudo de problemas em mecânica dos fluidos, por reproduzir uma dinâmica macroscópica não linear e extremamente complexa utilizando um algoritmo simples, de fácil implementação e baixo custo computacional. Adicionalmente, a interação do fluido com fronteiras sólidas pode ser facilmente modelada utilizando a reflexão das partículas que vão ao encontro do contorno. Esta condição de contorno, conhecida como *bounce back*, garante velocidade nula no contorno e permite uma fácil aplicação do LGA a geometrias complexas.

Apesar dos pontos positivos relacionados acima, este método apresentou várias deficiências significativas. Dentre estas ressalta-se: a) a dependência da pressão com a velocidade do fluido, problema que pode ser atenuado permitindo que mais partículas possam estar em repouso nos sítios, b) a ausência de invariância galileana na equação macroscópica para a evolução da quantidade de movimento, c) a existência de um limite inferior para o valor da viscosidade, dificultando assim o tratamento de problemas com valores altos do número de Reynolds e d) a presença de ruídos ou flutuações.

A principal estratégia adotada para contornar a presença das flutuações foi a utilização de médias temporais, espaciais ou de *ensemble*. Como média de *ensemble* entende-se a média dos resultados de várias simulações do mesmo problema com condições iniciais microscópicas distintas, porém com condições macroscópicas idênticas. Esta abordagem acarreta em um aumento significativo do custo computacional, o

que motivou propostas alternativas que deram origem ao método LB.

## 4.2 ORIGEM DA EQUAÇÃO LB

Visando eliminar os ruídos que ocorrem no *Lattice Gas*, McNamara e Zanetti<sup>[29]</sup> propuseram um método alternativo que simula diretamente a média de *ensemble*, ou seja, a média da ocupação de um sítio  $f_i = \langle n_i \rangle$ . O procedimento adotado pelos autores na obtenção da equação para  $f_i$  a partir do LGA é similar ao realizado para dedução da equação de Boltzmann a partir das leis da mecânica newtoniana. Por este motivo, o novo método foi denominado *Lattice Boltzmann Method* (LBM) ou Método de Boltzmann para redes.

Neste caso, a grandeza calculada,  $f_i(\mathbf{x}, t)$ , é um número real que representa a fração de partículas que se encontram no sítio  $\mathbf{x}$  com velocidade  $\mathbf{c}_i$  no tempo  $t$  e é conhecida como a função distribuição discreta. A equação que rege a evolução do LBM, denominada de *lattice Boltzmann equation* (LBE) ou equação de Boltzmann para redes, pode ser escrita na forma geral

$$f_i(\mathbf{x} + h\mathbf{c}_i, t + \delta) = f_i(\mathbf{x}, t) + \delta\Omega_i. \quad (4.3)$$

Nesta equação estão sintetizados os processos de colisão e propagação herdados do LGA, onde o parâmetro  $h$  é a distância entre os sítios adjacentes e  $\delta$  é o tempo que transcorre no problema físico durante um passo na simulação. O cálculo no lado direito da equação representa a colisão, enquanto a propagação consiste na atribuição do resultado desse cálculo para o lado esquerdo. O termo  $\Omega_i$  é conhecido como operador de colisão, novamente em analogia com a equação de Boltzmann da teoria cinética.

No LBM, a massa específica e a quantidade de movimento adimensionais são calculados, respectivamente, por meio das relações

$$\varrho = \sum_{i=0}^b f_i, \quad (4.4)$$

$$\varrho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^b f_i \mathbf{c}_i. \quad (4.5)$$

A primeira versão do método de Boltzmann para redes herdou diversas características do seu antecessor, tanto positivas, como a estabilidade numérica e a separação em etapas de colisão e propagação,

quanto negativas, como a dependência da pressão com a velocidade, a ausência de invariância galileana e a limitação nos valores da viscosidade.

Porém, nesta transição do LGA para o LBM, perde-se um dos aspectos mais notáveis do modelo booleano, o baixo custo computacional. Isto se deve, em grande parte, a dois fatores: ao aumento da quantidade de memória necessária acarretado pelo uso de variáveis de ponto flutuante e ao aumento do tempo de processamento requerido pela etapa de colisão, haja visto que este operador precisa computar a contribuição de todos os possíveis cenários de colisão. Estes fatores tornaram praticamente inviável a aplicação desta versão inicial do LBM para problemas tridimensionais.

O operador de colisão na forma inicialmente sugerida na Ref. [29] consiste em uma média do termo que trata das colisões no LGA, o que resulta em um operador não linear em  $f_i$ . Por este motivo, a equação resultante ficou conhecida como LBE não linear. Um trabalho posterior, apresentado por Higuera e Zanetti<sup>[30]</sup>, concentrou-se na simplificação deste operador. O caminho escolhido pelos autores para realizar tal simplificação foi expandir o operador de colisão em torno da distribuição encontrada no equilíbrio. Desprezando termos de segunda ordem nessa expansão, os autores chegaram a uma forma simplificada para o operador de colisão,

$$\Omega_i = \sum_{j=0}^b A_{ij}(f_j - f_j^{eq}) \quad (4.6)$$

onde  $A_{ij}$  permanece constante durante a simulação e pode ser determinado a partir do operador de colisão da LBE não linear. A equação que resulta do uso desse operador foi chamada de LBE quase-linear, pois embora tenha uma aparência linear em  $f_i$ , esta ainda apresenta termos não lineares, uma vez que  $f_j^{eq}$  depende de potências de  $\mathbf{u}$ , que por sua vez dependem de  $f_i$ . Mesmo com a permanência de termos não lineares, este procedimento tornou a etapa de colisão mais eficiente, permitindo o uso do LBM em problemas tridimensionais.

Motivados por este operador quase-linear, Chen et al.<sup>[31]</sup> sugeriram utilizar uma forma diagonal para a matriz  $A_{ij}$ , resultando na seguinte expressão para o operador de colisão:

$$\Omega_i = -\frac{1}{\tau}(f_i - f_i^{eq}), \quad (4.7)$$

onde  $\tau$  é um parâmetro do modelo chamado de tempo de relaxação,

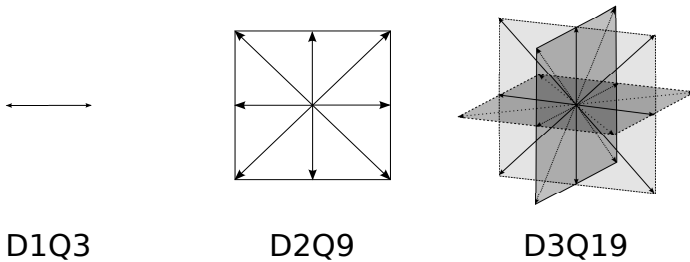
que permite controlar os coeficientes de transporte. Este operador de colisão é o análogo discreto do modelo BGK encontrado na Eq. (3.12), e por este motivo a equação LB resultante do uso desse operador é conhecida como *Lattice BGK Equation* (LBGK).

Independentemente, Qian, d’Humières e Lallemand<sup>[32]</sup> realizaram uma abordagem semelhante. A contribuição específica destes autores foi notar que a distribuição de equilíbrio utilizada no operador BGK não precisa ser necessariamente aquela herdada do método LGA. Partindo desta constatação, estes sugeriram uma nova forma para a distribuição de equilíbrio

$$f_i^{eq} = \varrho w_i \left[ 1 + 3(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + \frac{9}{2}(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - \frac{3}{2}u^2 \right]. \quad (4.8)$$

Esta expressão foi obtida pelos autores utilizando uma distribuição de equilíbrio em série de potências até segunda ordem da variável  $\mathbf{u}$ , sendo os coeficientes dessa expansão escolhidos de modo que o comportamento macroscópico corresponda aquele das equações de Navier-Stokes.

Como consequência dessa alteração, as redes formadas pelo conjunto de velocidades  $\mathbf{c}_i$  não ficam mais restritas aos requisitos de isotropia do LGA, sendo os pesos  $w_i$  escolhidos de maneira a assegurar a isotropia das equações macroscópicas. A Eq. (4.8) pode ser utilizada com redes unidimensionais, bidimensionais ou tridimensionais, sendo estas denotadas pela sigla *DdQb*, onde  $b$  é o número de velocidade e  $d$  é a dimensão. As principais redes deste grupo podem ser visualizadas na Figura 6, sendo que os pesos  $w_i$  são encontrados no Apêndice B.



**Figura 6:** Redes utilizadas por Qian, d’Humières e Lallemand<sup>[32]</sup>

Esta nova abordagem trouxe vantagens como a eliminação dos termos que dão origem à ausência de invariância galileana e à dependência da pressão com a velocidade. Estes modelos se tornaram amplamente utilizados, em virtude principalmente da simplicidade do opera-

dor BGK e das vantagens aqui citadas.

### 4.3 CONEXÃO COM A TEORIA CINÉTICA

Conforme descrito na seção anterior, o LBM foi inicialmente proposto como um aprimoramento dos métodos de gás em rede. Ressalta-se ainda que nesta primeira abordagem não havia uma conexão direta entre a equação de Boltzmann e a LBE. A similaridade na nomenclatura destas equações se motivou por estas serem análogas: A primeira descrevendo a evolução da média de *esemble* de um sistema composto por partículas que seguem as leis de Newtown, e a segunda, a evolução desta média para um mundo microscópico simplificado e discreto, cuja dinâmica é ditada pelas regras do LGA.

Em 1997, He e Luo<sup>[33]</sup> demonstraram pela primeira vez que a relação entre a LBE e a equação de Boltzmann é mais profunda do que uma simples analogia na derivação de ambas. Estes autores conseguiram obter a LBE prosta por Qian, d’Humières e Lallemand<sup>[32]</sup> através da aplicação de técnicas numéricas específicas a equação de Boltzmann com o modelo BGK. A técnica proposta consistia em um processo de discretização combinada das variáveis tempo, posição e velocidade, além de uma expansão em série da função distribuição de equilíbrio. A partir do trabalho de He e Luo<sup>[33]</sup>, determinadas formas da LBE passaram a ser interpretadas como formas discretas da equação de Boltzmann com o operador BGK, o que gerou a questão se tal procedimento poderia ser aprimorado com o objetivo de obter novos modelos numéricos.

Posteriormente, He, Chen e Doolen<sup>[34]</sup> apontaram uma falha nesta primeira derivação, onde nem todos os termos de primeira ordem no passo de tempo  $\delta$  eram considerados, propondo uma correção no procedimento original. Além desta discordância, na forma concebida por He e Luo<sup>[33]</sup> o procedimento de discretização do espaço de velocidades era restrito a obter as redes e distribuições de equilíbrio já existentes, sem apontar uma forma mais geral para realizar este procedimento que permitisse melhorar sistematicamente a precisão da equação discreta.

De modo independente, Shan, Yuan e Chen<sup>[8]</sup> e Philippi et al.<sup>[7]</sup> estenderam o processo de discretização do espaço de velocidades, permitindo melhorar de forma sistemática e consistente a ordem de descrição da distribuição de equilíbrio. No trabalho de Shan e colaboradores, o foco é desenvolver modelos capazes de simular escoamentos com altos valores do número de Knudsen, ou seja, para gases rarefeitos ou em

pequenas escalas de comprimento. Já o trabalho de Philippi et al tem como foco a derivação de modelos para problemas não-isotérmicos de maneira consistente com a teoria cinética.

Por ser central para o presente trabalho, o procedimento de discretização é apresentado em detalhe nesta seção. Vale ressaltar que, devido a evolução na forma e entendimento do processo de discretização, a abordagem utilizada aqui consiste no estado da arte desta técnica, diferindo assim do tratamento utilizado nos primeiros trabalhos<sup>[33, 34]</sup>.

### 4.3.1 Termo Advectivo

De modo a simplificar a análise, define-se a derivada advectiva como

$$D_t f \equiv \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f. \quad (4.9)$$

O resultado desta operação pode ser interpretado como a taxa de variação de  $f$  ao longo de uma linha de trajetória com velocidade constante  $\boldsymbol{\xi}$ .

Esta derivada pode ser aproximada numericamente de diferentes maneiras, o que resulta em uma grande variedade de formas discretas da equação de Boltzmann. Especificamente no método LB, a discretização das variáveis espacial e temporal é realizada de maneira conjunta. Ou seja, ao invés de aplicar técnicas numéricas isoladas para o cálculo de  $\partial f / \partial t$  e  $\nabla f$ , opta-se por obter uma forma discreta da operação  $D_t f$ .

Para esta finalidade, realiza-se a expansão em série de Taylor da função distribuição calculada no ponto  $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\xi}\delta$  e no tempo  $t + \delta$ ,

$$f(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) = f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta D_t f + \frac{\delta^2}{2} D_t^2 f + \frac{\delta^3}{6} D_t^3 f + \dots \quad (4.10)$$

Utilizando a definição da derivada advectiva em (4.9), nota-se que as equações para evolução da função distribuição abordadas no Capítulo 3, como a equação de Boltzmann, a equação de Enskog e a equação de primeira ordem da hierarquia BBGKY, se enquadram todas na forma geral

$$D_t f = \Omega. \quad (4.11)$$

Substituindo esta equação na expansão em série de Taylor da Eq. (4.10) e desprezando termos da ordem  $\delta^2$ , tem-se a equação discreta



$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \delta\Omega. \quad (4.12)$$

Denominada de LBE explícita, esta expressão é idêntica à obtida por He e Luo<sup>[33]</sup>, com a distinção de que os autores a obtiveram via integração da Eq. (4.11) sobre uma trajetória com velocidade constante  $\boldsymbol{\xi}$ . Por meio da análise da série de Taylor em (4.10), é possível afirmar com clareza que a relação discreta acima tem erros da ordem de  $\delta^2$ , o que se opõe à conclusão de He e Luo de que esta equação possui erros de terceira ordem em  $\delta$ .

Uma forma discreta de segunda ordem no passo de tempo  $\delta$  demanda o uso de uma expressão para a segunda derivada de  $f$ , como pode ser observado na Eq. (4.10). Esta pode ser obtida tomando a derivada advectiva da Eq. (4.11),

$$D_t^2 f = D_t \Omega = \frac{\Omega(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - \Omega(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\delta} + \mathcal{O}(\delta), \quad (4.13)$$

onde  $D_t \Omega$  foi aproximado em primeira ordem utilizando a série de Taylor para o termo  $\Omega(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta)$ , de forma similar ao já realizado para a função distribuição em (4.10). A substituição desta última expressão na série de Taylor da Eq. (4.10) tem como resultado a expressão

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) = f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \Omega\delta + \frac{\delta}{2} [\Omega(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, t + \delta) - \Omega(\mathbf{x}, t)] + \mathcal{O}(\delta^3), \quad (4.14)$$

que fornece uma relação discreta com erros de terceira ordem para o cálculo da evolução temporal da função distribuição.

Em uma primeira análise, conclui-se que a relação é uma expressão implícita para o cálculo da função distribuição  $f$ , em razão da existência de um termo referente ao valor do operador de colisão no tempo  $t + \delta$ . Porém, através da definição da função distribuição modificada,

$$\hat{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) \equiv f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - \frac{\delta}{2} \Omega(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t), \quad (4.15)$$

é possível reescrever a Eq. (4.14) na forma usual da LBE,

$$\hat{f}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) = \hat{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \Omega(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)\delta, \quad (4.16)$$

no qual os termos de terceira ordem foram desprezados. Nota-se que as equações para evolução de  $f$  em (4.12) e de  $\hat{f}$  em (4.16) são apa-

rentemente idênticas. Ressalta-se que  $\Omega$  em (4.16) deverá ser reescrito em função de  $\hat{f}$  o que tornará as equações distintas. Adicionalmente, a relação entre as variáveis macroscópicas a partir da função distribuição modificada  $\hat{f}$  será diferente daquela existente para  $f$ . Porém, no caso particular onde o operador de colisão conserva localmente a massa, a quantidade de movimento e a energia é possível demonstrar que não haverá diferenças entre as duas equações.

Nota-se que apesar de ter origem em uma equação implícita para a função  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)$ , a Eq. (4.16) é explícita para o cálculo da função distribuição modificada  $\hat{f}$ , sendo, por este motivo, muitas vezes referida como a versão semi-implícita da LBE.

No caso em que operador colisão conserva localmente a massa, quantidade de movimento e energia, conforme descrito nas Eqs. (3.8), (3.9) e (3.10), observa-se que as variáveis macroscópicas podem ser calculadas pela função distribuição modificada do mesmo modo como são calculadas pela função distribuição  $f$ , ou seja, através dos momentos da distribuição.

Posteriormente será discutida a importância de se eliminar erros de alta ordem em  $\delta$  nos modelos multifásicos. Com esta motivação, é proposto neste trabalho uma extensão do procedimento abordado nesta seção, visando um modelo com erros de quarta ordem.

### 4.3.2 Espaço de velocidades e função distribuição

Analisando as relações obtidas do processo de discretização das variáveis tempo e espaço, contidas nas Eqs. (4.12) e (4.16), nota-se que estas ainda não constituem um método computacional fechado pois a variável velocidade molecular  $\boldsymbol{\xi}$  é contínua.

Diferente do que ocorre com as outras duas variáveis, a variável  $\boldsymbol{\xi}$  não está relacionada, pelo menos em um contexto geral, com uma operação de diferenciação. Na realidade, esta variável está envolvida na integração que o ocorre no operador de colisão, conforme pode ser observado nas expressões para este operador que são encontradas nas Eqs (3.4), (3.12) e (3.13).

Em *Lattice-Boltzmann* emprega-se em geral o operador BGK ou extensões deste<sup>[35, 36]</sup>. Neste caso, a utilização de integrais no variável velocidade resume-se ao cálculo dos momentos da função distribuição que equivalem à massa específica, à quantidade de movimento e à energia. Através da análise multiescala<sup>[37]</sup> nota-se também que uma descrição correta das equações macroscópicas demanda que os momentos até

uma certa ordem da distribuição de equilíbrio discreta sejam calculados de forma exata. Como momento de ordem  $n$  da função distribuição entende-se os valores resultantes da integral

$$\int \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n} f(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}, \quad (4.17)$$

onde os índices  $\alpha_i$  se referem às componentes do vetor  $\boldsymbol{\xi}$ .

Logo, deseja-se realizar a passagem de uma variável contínua  $\boldsymbol{\xi}$  para um conjunto discreto e finito de velocidades  $\boldsymbol{\xi}_i$ , obedecendo a condição de que alguns dos momentos calculados via integração numérica coincidam com aqueles via integração usual. A maneira encontrada para realizar este procedimento foi aproximar a função distribuição através de uma série de polinômios da variável  $\boldsymbol{\xi}$  utilizando então o método de quadraturas para a integração numérica.

Tendo como motivação a forma da distribuição de Maxwell-Boltzmann, apresentada na Eq. (3.11), opta-se por expandir a função distribuição em uma série de polinômios de Hermite multidimensionais<sup>2</sup> ou tensores polinomiais de Hermite,

$$f(\boldsymbol{\xi}_o) = \left( \frac{1}{2\pi RT_o} \right)^{D/2} e^{-\boldsymbol{\xi}_o^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{r_n}^{(n)} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\boldsymbol{\xi}_o), \quad (4.18)$$

onde  $\mathcal{H}_{r_n}^{(n)}$  representa o polinômio de Hermite<sup>3</sup> de ordem  $n$  e  $a_{r_n}^{(n)}$  os coeficientes da expansão. A variável  $\boldsymbol{\xi}_o \equiv \boldsymbol{\xi}/(RT_o)^{1/2}$  é uma velocidade molecular adimensional, sendo  $T_o$  uma temperatura de referência. Esta definição visa simplificar a descrição, sendo que a utilização de  $T_o$  no lugar de  $T$  se faz necessária para evitar que as velocidades discretas sejam dependentes da temperatura.

No processo de discretização opta-se por truncar esta expansão em uma ordem  $N$ , onde  $N$  é a ordem do maior momento a ser mantido. Esta simplificação não afeta o cálculo dos momentos pois as funções polinomiais  $\xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n}$  de ordem  $n \leq N$  são ortogonais aos polinômios de Hermite com ordem superior a  $N$ , ou seja,

<sup>2</sup>A definição dos polinômios de Hermite, assim como suas propriedades encontram-se no Apêndice A

<sup>3</sup>Se  $A$  é um tensor de ordem  $n$  e  $r_n = \alpha_1, \alpha_2 \dots \alpha_n$  é o conjunto de  $n$  índices que caracteriza um de seus elementos, denotar-se-á este elemento como  $A_{r_n}^{(n)}$ . Também será utilizada a convenção de Einstein para soma, onde índices repetidos indicam uma soma sobre os possíveis valores dos índices.

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\xi_o^2/2} \xi_{\alpha_1} \xi_{\alpha_2} \dots \xi_{\alpha_n} \mathcal{H}_{r_m}^{(m)}(\xi_o) d\xi_o = 0,$$

se  $n \leq N$  e  $m > N$ . Já que a contribuição dos termos de alta ordem para este caso é nula, sua supressão não afeta o cálculo dos momentos de ordem inferior.

Conforme apontado anteriormente, em conjunto com esta expansão, utiliza-se um processo de quadratura para a integração numérica. Este procedimento possui a característica de fornecer resultados exatos para a integração de polinômios até uma determinada ordem, dependendo do número de nós utilizados na integração. Em razão do uso dos polinômios de Hermite e da função peso  $e^{-\xi_o^2/2}$ , o procedimento de quadratura adotado é o de Gauss-Hermite, que tem a forma:

$$\frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\xi_o^2/2} g(\xi_o) d\xi \approx \sum_{i=0}^b \omega_i g(\xi_{o,i}). \quad (4.19)$$

onde  $\omega_i$  são os pesos discretos e  $\xi_{o,i}$  são os vetores velocidades discretos adimensionais ou nós da quadratura.

O LBM utiliza velocidades discretas que geram redes regulares no espaço, de modo que em um passo de tempo as partículas se deslocam exatamente a distância entre os sítios, o que por sua vez garante que o esquema colisão-propagação, herdado do LGA, pode ser utilizado. Para que este pré-requisito seja satisfeito, utiliza-se uma quadratura onde as velocidades discretas,  $\xi_{o,i}$  são estipuladas *a priori*. As velocidades adimensionais são restritas a forma  $\xi_{o,i} = a\mathbf{c}_i$ , onde  $\mathbf{c}_i$  são os vetores velocidades de rede que contém somente componentes com valores inteiros, e  $a$  é um fator de escala a ser determinado.

Philippi et al.<sup>[7]</sup> denominaram este processo de quadratura prescrita e propuseram um método simplificado para determinar os pesos  $\omega_i$  e o fator de escala  $a$  que garantem que a integração numérica de polinômios até a ordem  $2N$  seja exata. Os autores mostram que esta exigência é equivalente a garantir que a norma dos polinômios de Hermite até ordem  $N$  sejam exatos, ou recuperados, a partir da quadratura, ou seja,

$$\int \frac{e^{-\xi_o^2/2}}{(2\pi)^{D/2}} \left[ \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\xi_o) \right]^2 d\xi = \sum_{i=0}^b \omega_i \left[ \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(a\mathbf{c}_i) \right]^2,$$

para todo  $\mathcal{H}_{r_n}^{(n)}$  em que  $n \leq N$ . Esta imposição gera então um sistema de equações que permite o cálculo de  $\omega_i$  e  $\mathbf{a}$  para um dado conjunto de velocidades  $\mathbf{c}_i$ . Nota-se que quanto maior é a ordem  $N$  utilizada na expansão, maior é o número de equações e, conseqüentemente, maior deve ser o número de velocidades discretas necessárias para que o sistema possua solução.

De modo a compatibilizar a notação com aquela usualmente empregada em LB, define-se a função distribuição discreta como:

$$f_i(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\omega_i}{\rho_0} (2\pi RT_o)^{D/2} e^{\xi_{o,i}^2/2} f(\mathbf{x}, \xi_i, t) = \omega_i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{r_n}^{(n)} \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\mathbf{a}\mathbf{c}_i) \quad (4.20)$$

onde  $\rho_0$  é uma massa específica de referência, incluída de modo a adimensionalizar a massa específica. Utilizando a equação já discreta no tempo e espaço, Eq. (4.12), combinada com o operador de colisão BGK, da Eq. (3.12), e aplicando a definição acima, obtém-se a equação discreta,

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i h, t + \delta) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{f_i - f_i^{eq}}{\tau/\delta}, \quad (4.21)$$

que corresponde LBGK proposta por Qian, d'Humières e Lallemand<sup>[32]</sup>, obtida originalmente a partir do LGA.

As variáveis macroscópicas do fluido, definidas nas Eqs. (3.5), (3.6) e (3.7), são calculadas através da integração numérica por quadratura. Com a definição da função distribuição discreta em (4.20), as relações discretas para o cálculo destas variáveis assumem uma forma bastante simplificada, uma vez que os pesos da quadratura já estão incluídos na distribuição,

$$\varrho \equiv \frac{\rho}{\rho_0} = \sum_{i=0}^b f_i, \quad (4.22)$$

$$\varrho \mathbf{u} \equiv \frac{\rho \mathbf{v}}{\rho_0 h/\delta} = \sum_{i=0}^b f_i \mathbf{c}_i, \quad (4.23)$$

$$\frac{D}{2} \frac{\varrho(\Theta + 1)}{a^2} \equiv \frac{D\rho RT/2}{\rho_0(h^2/\delta^2)} = \sum_{i=0}^b f_i \frac{|\mathbf{c}_i - \mathbf{u}|^2}{2}. \quad (4.24)$$

onde definiu-se a temperatura adimensional  $\Theta = T/T_0 - 1$ , e utilizou-se

a expressão

$$\frac{h^2}{\delta^2} = a^2 R T_o$$

que pode ser constatada comparando as diferentes formas para a velocidade microscópica  $\xi = (h/\delta)\mathbf{c}_i = a\sqrt{RT_o}\mathbf{c}_i$ . Estas relações definem as variáveis massa específica, velocidade e temperatura na forma adimensional. Tais variáveis são muitas vezes referidas na literatura como variáveis em unidades de rede, já que os parâmetros utilizados na adimensionalização são  $\rho_0$ ,  $h$  e  $\delta$ .

#### 4.3.2.1 Redes e distribuições de equilíbrio

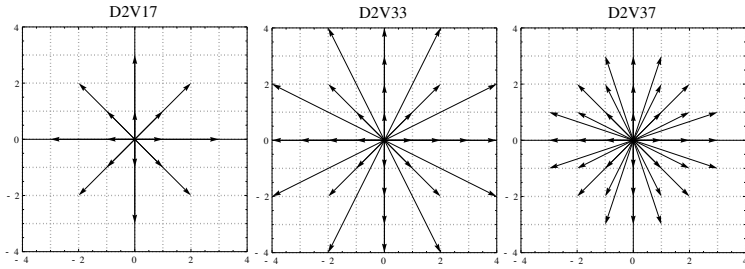
Os coeficientes da expansão da função distribuição podem ser obtidos utilizando a Eq. (4.18) juntamente com a ortogonalidade dos tensores polinomiais de Hermite, o que resulta na relação

$$a_{r_n}^{(n)} = \int f(\xi) \mathcal{H}_{r_n}^{(n)}(\xi_o) d\xi.$$

De especial interesse é a expansão da função distribuição de equilíbrio, já que esta é utilizada explicitamente no operador de colisão BGK. Aplicando a expressão anterior à distribuição de Maxwell-Boltzmann em (3.11) e utilizando a definição da distribuição discreta da Eq. (4.20) obtém-se até quarta ordem

$$\begin{aligned} \frac{f_i^{eq}}{\rho w_i} = & \underbrace{1}_{n=0} + \underbrace{a^2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})}_{n=1} + \underbrace{\frac{1}{2} [a^4(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - a^2 u^2 + \Theta(a^2 c_i^2 - D)]}_{n=2} + \\ & \underbrace{\frac{1}{6} [a^6(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^3 - 3a^4 u^2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u}) + 3\Theta a^2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})(a^2 c_i^2 - D - 2)]}_{n=3} + \\ & \underbrace{\frac{1}{24} \{a^8(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^4 - 6a^6 u^2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 + 3a^4 u^4 + 3\Theta^2 [a^4 c_i^4 - (D+2)(2a^2 c_i^2 - D)] + 6\Theta [a^6 c_i^2(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 - (D+4)a^4(\mathbf{c}_i \cdot \mathbf{u})^2 + (D+2)a^2 u^2 - a^4 c_i^2 u^2]\}}_{n=4}. \end{aligned} \quad (4.25)$$

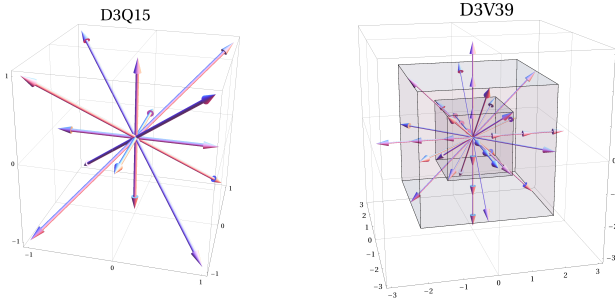
Siebert<sup>[37]</sup> demonstrou por meio da análise de Chapman-Enskog, juntamente com a realização de simulações, que para problemas isotérmicos um modelo de terceira ordem consegue reproduzir corretamente as equações macroscópicas, sendo que para uma descrição correta de problemas não isotérmicos a quarta ordem deve ser incorporada. Logo, se a temperatura pode ser considerada constante no problema a ser descrito, os termos correspondentes a quarta ordem,  $n = 4$ , podem ser desprezados e o valor da temperatura fixada em  $\Theta = 0$ , o que simplifica a expressão anterior.



**Figura 7:** Redes ou conjunto de velocidades  $\mathbf{c}_i$  para problemas bidimensionais.

Para utilização de uma distribuição com termos até a ordem  $N$ , é necessário a aplicação conjunta de uma quadratura capaz de calcular os momentos até esta ordem. A Figura 7 mostra vetores  $\mathbf{c}_i$  para as redes bidimensionais<sup>[7]</sup> de terceira ordem (D2V17) e quarta ordem (D2V33 e D2V37) encontradas utilizando o método das abscissas prescritas. As redes tridimensionais compatíveis com segunda (D3Q15) e terceira ordem (D3V39) são mostradas na Figura. 8. O problema de encontrar a rede mínima em três dimensões capaz de computar corretamente momentos de quarta ordem foi tratado por Shan<sup>[38]</sup>, que demonstrou a existência de uma rede de 103 velocidades que satisfaz tais condições. Os pesos  $w_i$  e o fator de escala  $a$  para estas redes encontram-se no Apêndice B.

Observa-se na Tabela. (1) uma comparação entre o número mínimo de velocidades necessário para cada ordem, tanto em casos bidimensionais quanto tridimensionais. Nota-se um rápido aumento do número de velocidades com a ordem máxima  $N$  dos momentos mantidos na distribuição discreta.



**Figura 8:** Conjunto de velocidades  $\mathbf{c}_i$  para redes tridimensionais.

Vale ressaltar que este processo de discretização recupera alguns dos modelos já existentes na literatura, especialmente os mais utilizados atualmente, que são os modelos de segunda ordem que empregam as redes  $D2Q9$ ,  $D3Q19$ <sup>[32]</sup>.

Os modelos obtidos via abscissas prescritas são capazes de simular tanto problemas não-isotérmicos quanto problemas térmicos de maneira consistente<sup>[37, 39]</sup>, apresentando também bons resultados em relação a estabilidade numérica<sup>[40]</sup>. Por este motivo, o modelo multifásico aqui descrito utiliza o método das abscissas prescritas como base fundamental para obtenção das formas discretas das equações que descrevem o modelo de fluido não-ideal.

**Tabela 1:** Número de velocidades necessárias e a ordem máxima dos momentos recuperados para duas e três dimensões.

Dimensão	Ordem	Número de Velocidades
2	2	9
2	3	17
2	4	33
3	2	15
3	3	39
3	4	103



## 5 REVISÃO DOS MODELOS MULTIFÁSICOS

Por descrever o fluido em nível mesoscópico, o LBM contém uma estrutura básica ideal para a incorporação dos efeitos que resultam em um comportamento não-ideal do fluido e, consequentemente, na possibilidade de coexistência de mais de uma fase. Esta potencialidade do método foi observada por diversos autores pouco tempo após o surgimento do LBM e tem sido, até os dias atuais, uma das áreas onde este tem obtido maior aceitação e aplicabilidade.

Neste capítulo é realizada uma revisão dos principais modelos LB propostos na área de fluidos não-ideais. Em cada trabalho abordado, são apontados os pontos fortes e fragilidades, assim como o respectivo escopo de aplicação de cada modelo.

### 5.1 MODELO SHAN-CHEN

Apesar de existirem propostas anteriores voltadas a escoamentos multifásicos<sup>[41]</sup> utilizando a LBE, o modelo proposto por Shan e Chen<sup>[42]</sup> em 1994 foi o primeiro modelo capaz de reproduzir uma transição de fase líquido-vapor. Em oposição aos modelos multifásicos já existentes, que distinguiam as fases através de uma variável de cor e onde a lei de Laplace era imposta usando uma força externa, o modelo Shan-Chen introduziu uma interação entre as partículas que resultam em um comportamento não-ideal, assim como no surgimento de duas fases.

O modelo líquido-vapor tem sua origem em um trabalho anterior destes autores<sup>[43]</sup>, onde eles propõem uma LBE para escoamentos multicomponentes na qual a interação entre as diferentes espécies ocorre por meio de um potencial médio. Escolhendo os parâmetros adequados<sup>[44]</sup>, observa-se que as componentes se separam em fases distintas, onde a interface criada entre tais fases segue aproximadamente a lei de Laplace. Posteriormente, Shan e Chen<sup>[42]</sup> identificaram que, impondo uma interação entre as partículas de uma mesma espécie, a equação já existente era capaz de descrever um escoamento monocomponente com uma transição de fase líquido-vapor.

A estrutura básica deste modelo consiste na aplicação da LBGK, encontrada em (4.21), utilizando a rede D2Q9 para problemas bidimensionais ou as redes D3Q15 e D3Q19 para problemas tridimensionais. A contribuição dos autores consiste na incorporação de uma força entre

as partículas dada pela expressão,

$$\mathbf{f} = -36G\Psi(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^b w_i \Psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) \mathbf{c}_i, \quad (5.1)$$

onde  $\Psi$ , denominada de massa efetiva, é na realidade uma função da massa específica  $\varrho$ . Esta força é então adicionada à LBGK por meio da alteração da velocidade do fluido antes da colisão, ou seja, a velocidade utilizada para o cálculo da distribuição de equilíbrio será dada por,

$$\varrho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^b f_i \mathbf{c}_i + \tau \varrho \mathbf{f}.$$

Aplicando a análise multiescala, é possível demonstrar que a adição desta força altera o comportamento do fluido, que antes era de gás ideal, resultando em um equação de estado não-ideal na forma

$$p(\varrho) = \frac{1}{3} \varrho + 6G\Psi(\varrho)^2. \quad (5.2)$$

Dependendo da função  $\Psi(\varrho)$  utilizada, a pressão deixa de ser uma função que cresce monotonicamente com  $\varrho$ , permitindo assim a coexistência das fases líquido e vapor. Por uma questão de estabilidade numérica, os autores propõem uma massa efetiva na forma:

$$\Psi(\varrho) = 1 - e^{-\varrho}. \quad (5.3)$$

A aplicação da massa efetiva da expressão anterior resulta em uma equação de estado que possui um ponto crítico descrito pelos parâmetros  $G_c = -1/9$  e  $\varrho_c = \ln 2$ . Logo, para valores de  $G$  menores que  $G_c$  o sistema poderá apresentar duas fases distintas, uma fase líquida  $\varrho_l > \varrho_c$  e uma fase vapor com massa específica  $\varrho_v < \varrho_c$ .

Um dos aspectos mais criticados deste modelo diz respeito à inconsistência termodinâmica. Das leis da termodinâmica, espera-se que as massas específicas na fase líquida e vapor, para um dado valor do parâmetro  $G$ , possam ser encontradas utilizando o equilíbrio mecânico entre as duas fases,  $p(\varrho_l) = p(\varrho_v)$ , juntamente com a construção de Maxwell, que é descrita pela relação

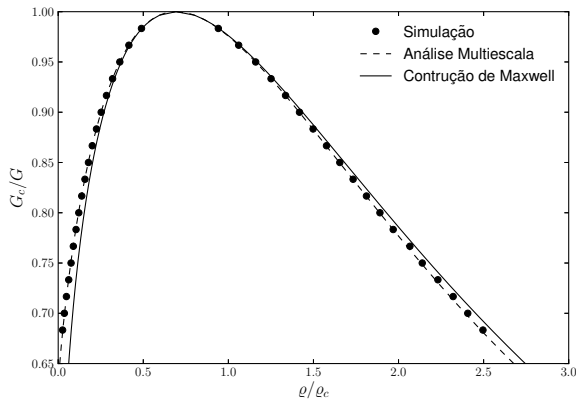
$$\int_{\varrho_v}^{\varrho_l} \frac{p(\varrho_l) - p(\varrho)}{\varrho^2} d\varrho = 0. \quad (5.4)$$

Entretanto, a aplicação da análise multiescala mostra que a curva de coexistência entre as duas fases não coincide com os resultados previstos

pela termodinâmica, obedecendo à relação

$$\int_{\varrho_v}^{\varrho_l} [p(\varrho_l) - p(\varrho)] \frac{\Psi'(\varrho)}{\Psi(\varrho)} d\varrho = 0 \quad (5.5)$$

no lugar da construção de Maxwell. A Figura 9 mostra uma comparação entre as curva de coexistência numérica e teórica, onde fica evidente a discrepância entre o comportamento do modelo e aquele previsto pela termodinâmica. Comparando as Eqs (5.4) e (5.5) nota-se que as duas relações coincidirão se a função massa efetiva possuir a forma  $\Psi(\varrho) = \Psi_0 e^{-\varrho_0/\varrho}$ . Porém, tal função não é empregada pelos os autores sob a justificativa de que esta resulta em sérios problemas de estabilidade numérica.



**Figura 9:** Curva de coexistência analítica e simulada para o modelo de Shan-Chen. As constantes  $\varrho_c = \ln 2$  e  $G_C = -1/9$  correspondem aos parâmetros críticos do modelo.

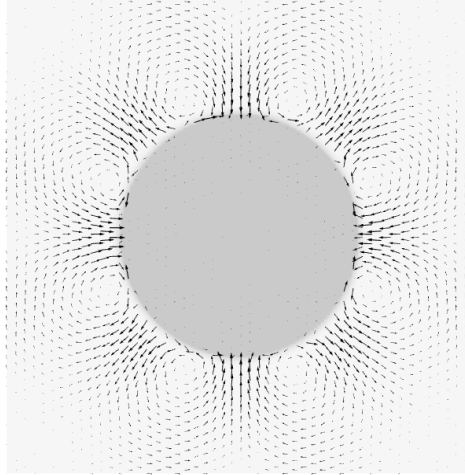
O problema da inconsistência com as leis da termodinâmica é minimizado pelos autores, pois sendo o modelo proposto para problemas isotérmicos na qual a equação de estado não corresponde a um fluido real, não há necessidade de que as massas específicas das fases vapor e líquida coincidam com aquelas dadas pela construção de Maxwell. Outros autores<sup>[45]</sup> apontaram que o comportamento do modelo Shan-Chen diverge sensivelmente das curvas teóricas, tanto a obtida via análise multiescala quanto a obtida via construção de Maxwell, com a variação

do tempo de relaxação. A aplicação do modelo demonstra também<sup>[46]</sup> que este torna-se instável a medida que a razão entre as massas específicas das fases aumenta, sendo que a razão máxima obtida da ordem de  $\varrho_l/\varrho_v \sim 50$ .

Além da curva de coexistência, a análise multiescala resulta em uma expressão integral para o cálculo da tensão superficial que é função dos parâmetros  $G$  e da função  $\Psi$  utilizada. Os autores demonstram a validade desta relação através da verificação da lei de Laplace. Porém é demonstrado na Ref. [45] que o valor da tensão superficial difere da previsão teórica com o aumento do valor do tempo de relaxação, chegando a apresentar erros superiores à 100% em relação à previsão teórica para  $(\tau/\delta) = 1,5$ . Outro aspecto negativo deste modelo é a existência de um único parâmetro livre, além do tempo de relaxação. Logo, a tensão superficial, a largura da interface e as massas específicas das fases não podem ser ajustadas de maneira independente.

Nota-se durante as simulações a ocorrência de correntes espúrias, característica que é compartilhada também por quase todos os métodos multifásicos, tanto os que utilizam a LBE quanto aqueles que usam abordagens puramente macroscópicas<sup>[47]</sup>. Este fenômeno consiste no surgimento de vórtices não físicos nas regiões próximas à interface, conforme pode ser observado na Figura 10, sendo estes observados mesmo em situações estáticas. A origem deste efeito numérico é bastante discutida na literatura, onde diversos trabalhos<sup>[10, 48–50]</sup> abordando especificamente o tema foram publicados nos últimos anos. Apesar destes estudos apontarem diversos indícios sobre a fonte deste erro, não há ainda um consenso sobre o assunto.

Principalmente em virtude da sua simplicidade, o modelo Shan-Chen é amplamente utilizado<sup>[51, 52]</sup> para simulação de escoamentos multifásicos, tanto monocomponente quanto multicomponente. Dentre suas aplicações estão o estudo de escoamentos multifásicos em meios porosos, de espalhamento de gotas e de escoamento multifásico na presença de surfactantes. Infelizmente, uma generalização do modelo Shan-Chen para problemas não-isotérmicos é bastante difícil. Isto se deve, sobretudo, às inconsistências termodinâmicas do modelo, consequência do fato de que este é inspirado pela física microscópica mas não necessariamente derivado a partir desta.



**Figura 10:** Correntes espúrias em uma gota utilizando o método Shan-Chen

### 5.1.1 Modificações do Modelo Shan-Chen

A simplicidade e eficiência computacional do modelo Shan-Chen o tornaram referência em escoamentos multifásicos utilizando a LBE. Tais pontos positivos motivaram diversos autores a propor modificações no modelo original, tentando assim eliminar suas falhas e ampliar seu escopo de aplicação.

A escolha da forma da função massa efetiva em (5.3) teve como objetivo obter um método com melhor estabilidade numérica. Em decorrência desta opção, a EOS resultante possui um caráter artificial, uma vez que esta não se assemelha ao comportamento de nenhum fluido real. Visando modificar esta característica, Sankaranarayanan et al.<sup>[53]</sup> e Yuan e Schaefer<sup>[46]</sup> propuseram, de modo independente, isolar a massa efetiva na equação de estado do modelo, Eq. (5.2), o que permite escrever  $\Psi$  em função da equação de estado a ser incorporada ao modelo

$$\Psi(\varrho) = \sqrt{\frac{2(p - \frac{1}{3}\varrho)}{6G}}. \quad (5.6)$$

A substituição da relação anterior na Eq. (5.1) permite observar que o

parâmetro  $G$  perde a influência sobre a força intermolecular. Logo, se a Eq. (5.6) for utilizada, a razão entre as massas específicas, a espessura da interface e a tensão superficial serão controlados unicamente através do valor da temperatura presente na EOS. Observa-se que o comportamento do modelo com respeito à razão máxima entre as massas específicas e quanto ao valor das correntes espúrias<sup>[46, 54]</sup> dependem fortemente da equação de estado escolhida. Esta afirmação é evidenciada através dos resultados reportados por Yuan e Schaefer<sup>[46]</sup> que obtêm uma razão máxima entre as massas específicas das fases líquida e vapor da ordem de 7 para a equação de estado de Van der Waals e superior a 1000 para a equação de Carnahan-Starling, em contraponto a razão de 50 para a versão original do modelo.

O estudo das correntes espúrias foi alvo do trabalho de Shan<sup>[49]</sup>, onde o autor argumenta que tais erros têm origem em termos azimutais que resultam do cálculo da força intermolecular. Para embasar seu ponto de vista, o autor utiliza a expressão (5.1), expandindo o termo  $\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i)$  em série de Taylor

$$\mathbf{f} = -36G\Psi(\mathbf{x}) \left[ \nabla\Psi \cdot \sum_{i=1}^b w_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i + \frac{1}{3!} \nabla\nabla\nabla\Psi : \sum_{i=1}^b w_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i \mathbf{c}_i + \dots \right].$$

Pela análise multiescala, observa-se que os termos proporcionais a  $\nabla\Psi$  e  $\nabla\nabla^2\Psi$  são essenciais para ocorrência da separação das fases. O autor argumenta então que as correntes espúrias ocorrem devido à existência de componentes azimutais nos termos de ordem superior. Utilizando este raciocínio, a utilização de redes com maior simetria, ou seja, que gere tensores  $\sum_i w_i w_i \mathbf{c}_i \dots \mathbf{c}_i$  simétricos até uma ordem maior, deve reduzir as correntes espúrias, já que os termos azimutais ficam restritos às ordens maiores. Através do resultado de simulações é possível comprovar os argumentos utilizados. Todavia, ainda que diminua o valor das velocidades próximas à interface, esta redução ocorre dentro da mesma ordem de grandeza. Logo, apesar de apontar corretamente para a necessidade da utilização de redes de alta ordem de isotropia, este resultado evidencia que a simetria da rede não é o único responsável pela formação das correntes espúrias.

Como abordado anteriormente, a maior limitação do método Shan-Chen concerne a impossibilidade do ajuste independente das massas específicas das fases e da tensão interfacial. De modo a contornar tal dificuldade, Sbragaglia et al.<sup>[55]</sup> utilizou uma força intermolecular onde a interação é estendida aos segundos vizinhos

$$\mathbf{f} = -36\Psi(\mathbf{x}) \sum_{i=1}^b w_i [G_1\Psi(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) + G_2\Psi(\mathbf{x} + 2\mathbf{c}_i)] \mathbf{c}_i.$$

Através da análise teórica do modelo é possível demonstrar que a razão entre as massas específicas depende do parâmetro  $G_1 + 2G_2$  e a tensão superficial do parâmetro  $G_1 + 8G_2$ , permitindo assim o ajuste independente destas grandezas.

Ressalta-se que trabalhos posteriores mostraram que no método Shan-Chen a tensão superficial e as massas específicas das fases dependem do tempo de relaxação<sup>[45]</sup>. Consequentemente, as simulações concordam com as previsões teóricas somente para valores do tempo de relaxação próximos à 0,5. Recentemente, Huang, Krafczyk e Lu<sup>[45]</sup> mostraram que esta dependência pode ser eliminada mudando a forma de incorporação da força intermolecular à LBE, porém tal alteração torna o método instável.

## 5.2 MODELO SWIFT-ORLANDINI

O modelo proposto por Swift et al.<sup>[56]</sup> utiliza a premissa de que o escoamento multifásico será corretamente descrito em nível macrocópico se o tensor tensão tiver a forma da Eq. (2.27). Ou seja, a LBE proposta pelos autores visa compatibilizar o comportamento macroscópico do fluido com aquele fornecido pelo modelo da interface difusa.

Com esta finalidade, o modelo utiliza um operador do tipo BGK com uma distribuição de equilíbrio modificada. Tendo em vista que o segundo momento da função distribuição é responsável pelo termo de pressão, o que pode ser demonstrado via análise multiescala, os autores propõem modificar este momento de  $f_i^{eq}$  de modo que,

$$\sum_{i=0}^b f_i^{eq} c_{i,\alpha} c_{i,\beta} = \varrho u_\alpha u_\beta + \left( p - \kappa \varrho \nabla^2 \varrho - \frac{\kappa}{2} |\nabla \varrho|^2 \right) + \kappa \frac{\partial \varrho}{\partial x_\alpha} \frac{\partial \varrho}{\partial x_\beta} \quad (5.7)$$

onde  $p$  representa a equação de estado do fluido e  $\kappa$  é um parâmetro utilizado para o ajuste da tensão superficial. À esta condição, adiciona-se a imposição de que os momentos de ordem zero e de primeira ordem devem corresponder, respectivamente, a massa específica e a quantidade de movimento conforme Eqs. (4.4) e (4.5). De modo a satisfazer

tais imposições, uma distribuição de equilíbrio de segunda ordem com coeficientes livre é proposta,

$$f_i^{eq} = A + Bu_\alpha c_{i,\alpha} + Cu^2 + Du_\alpha u_\beta c_{i,\alpha} c_{i,\beta} + G_{\alpha\beta} c_{i,\alpha} c_{i,\beta},$$

$$f_0^{eq} = A_0 + C_0 u^2.$$

Ressalta-se que o número de coeficientes a determinar é maior que o número de imposições sobre  $f_i^{eq}$ , logo há mais de uma solução possível para este sistema. Utilizando uma rede hexagonal, os autores optaram por coeficientes na forma

$$A = \frac{1}{3}(p - \kappa \varrho \nabla^2 \varrho), \quad C = -\frac{\varrho}{6}, \quad , \quad D = \frac{2}{3}\varrho, \quad G_{xy} = \frac{2}{3}\kappa \frac{\partial \varrho}{\partial x} \frac{\partial \varrho}{\partial y}$$

$$G_{xx} = -G_{yy} = \frac{\kappa}{3} \left[ \left( \frac{\partial \varrho}{\partial x} \right)^2 - \left( \frac{\partial \varrho}{\partial y} \right)^2 \right],$$

$$A_0 = \varrho - 2(p - \kappa \varrho \nabla^2 \varrho), \quad C_0 = -\varrho$$

A arbitrariedade na escolha dos coeficientes, dificulta a extensão deste modelo para diferentes tipos de rede, incluindo as tridimensionais. Isto ocorre pois diferentes escolhas levam a modelos com comportamento diferente com respeito à estabilidade numérica e acarretaram em erros distintos nas equações macroscópicas

Ainda que a nova distribuição de equilíbrio altere efetivamente o tensor tensão nas equações macroscópicas<sup>[57]</sup>, este também dá origem a termos espúrios na equação de balanço de quantidade de movimento. Como apontado pelos próprios autores, tais termos implicam em uma quebra da invariância galileana nas equações macroscópicas, ou seja, o resultado da simulação fica dependente da velocidade do referencial, o que é extremamente indesejável. Tais deficiências do modelo resultam do modo artificial com que o tensor tensão é modificado, o que ignora a natureza cinética do modelo. Isto pode ser visualizado através da Eq. (5.7), onde o lado esquerdo da equação representa o fluxo microscópico de quantidade de movimento devido ao movimento das partículas, enquanto que o tensor pressão no lado direito contém termos que são resultados da interação molecular a longa distância. Logo, uma igualdade entre tais termos é inconsistente do ponto de vista físico. Adicionalmente, em decorrência da instabilidade numérica, a aplicação deste modelo fica limitada a razões de massa específica da ordem de



$$\varrho_l/\varrho_v \sim 10.$$

Embora o modelo Swift-Orlandini apresente várias deficiências, o trabalho contribui para o entendimento de que a representação tanto da energia livre de Helmholtz quanto do tensor tensão devem ser compatíveis com aquelas do modelo da interface difusa. Adicionalmente, a proposta de Swift et al.<sup>[56]</sup> permite controlar a tensão superficial de maneira independente por meio do parâmetro  $\kappa$ , o que constitui a principal limitação do modelo proposto por Shan e Chen.

### 5.3 MODELO DE LEE & FISCHER

Assim como a grande maioria dos modelos LB multifásicos, os modelos Shan-Chen e Swift-Orlandini foram propostos visando a um comportamento macroscópico específico, onde a equação cinética discreta foi ajustada livremente para atender tal objetivo. Logo, não era o interesse dos autores que o modelo descrevesse corretamente o comportamento a nível mesoscópico.

Em 1998, He, Shan e Doolen<sup>[58]</sup> propuseram uma nova abordagem para descrever o comportamento de um fluido não-ideal em nível mesoscópico. A descrição apresentada por estes alia o tratamento das colisões através de uma versão simplificada do operador de Enskog, Eq. (3.13), com uma interação de longa distância por meio de um potencial médio. As simplificações utilizadas pelos autores permitem escrever a equação resultante em uma forma semelhante à equação de Boltzmann, porém com a adição de um termo semelhante a uma força externa, cuja forma é apresentada abaixo

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f = \Omega + \frac{f^{eq}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})}{RT} \cdot [\nabla(\rho RT - p) + \kappa \rho \nabla \nabla^2 \rho]. \quad (5.8)$$

Zou e He<sup>[59]</sup> mostraram que esta abordagem leva a uma equação para a quantidade de movimento compatível com o modelo da interface difusa, encontrada em (2.29).

Tendo em vista o comportamento no limite macroscópico da equação anterior, Lee e Fischer<sup>[50]</sup> sugeriram incorporar o termo adicional desta equação diretamente na LBGK. Em conjunto com tal alteração, os autores propõem reescrever o gradiente da pressão em termos do gradiente do potencial químico, o que pode ser realizado por meio da relação para a pressão em (2.21),

$$\nabla p = \nabla(\rho\mu) - \underbrace{\frac{\partial\psi}{\partial\rho}}_{\mu} \nabla\rho = \rho\nabla\mu,$$

onde assume-se que a temperatura é constante. Ao invés de uma abordagem generalista, o modelo proposto por Lee e Fischer utiliza uma equação de estado específica, com objetivo de simplificar a determinação do tamanho da interface e da tensão superficial. O potencial químico sugerido é uma expressão cúbica da massa específica dada por

$$\mu^* = \frac{\mu}{h^2/\delta^2} = 4\beta(\varrho - \varrho_l)(\varrho - \varrho_v) \left[ \varrho - \left( \frac{\varrho_l + \varrho_v}{2} \right) \right] \quad (5.9)$$

onde  $\beta$  é um parâmetro livre. Nota-se que as massas específicas das fases  $\varrho_l$  e  $\varrho_v$  podem ser substituídas diretamente na expressão anterior, sendo portanto parâmetros livres. Segundo os autores, a relação anterior pode ser obtida através de uma aproximação do potencial químico para um fluido próximo ao ponto crítico.

Incorporando o termo de força à LBE semi-implícita, juntamente com as aproximações citadas, obtém-se a expressão

$$\begin{aligned} \hat{f}_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i, t) - \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) = & -\frac{\hat{f}_i - f_i^{eq}}{\tau/\delta + 1/2} \\ & + 3\frac{f_i^{eq}(\mathbf{c}_i - \mathbf{u})}{\varrho} \cdot [\nabla(\varrho/3) - \varrho\nabla(\mu^* - \kappa^*\nabla^2\varrho)] \end{aligned} \quad (5.10)$$

sendo esta utilizada em conjunto com as redes D2Q9, D3Q15 ou D3Q19.

Conforme citado, a utilização da relação (5.9) para o potencial químico permite relacionar de forma simples os parâmetros do modelo com a largura da interface e com a tensão superficial,

$$\begin{aligned} \kappa^* &= \frac{\beta(\lambda_I^*)^2}{8}(\varrho_l - \varrho_v)^2 \\ \gamma^* &= \frac{(\varrho_l - \varrho_v)^3}{6}\sqrt{2\kappa^*\beta} \end{aligned}$$

onde  $\lambda_I^* = \lambda_I/h$  é a espessura adimensional da interface e a tensão superficial adimensional é dada por  $\gamma^* = \gamma/(\rho_0 h^3/\delta^2)$ .

Para o cálculo dos gradientes, o modelo de Lee-Fischer utiliza um procedimento composto pela média da aplicação de diferenças centrais

e a montante (*upwind*), ambas de segunda ordem. Esta operação é denominada de diferenças mistas e resulta na fórmula

$$\nabla^M g = \frac{3}{2} \sum_{i=0}^b \frac{\omega_i \mathbf{c}_i}{\rho} [-g(\mathbf{x} + 2\mathbf{c}_i) + 6g(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) - 3g(\mathbf{x})]. \quad (5.11)$$

onde  $g$  é uma função qualquer da posição. Adicionalmente, os autores propõem uma expressão específica para o cálculo do gradiente contido no produto  $\mathbf{c}_i \cdot \nabla$ ,

$$\mathbf{c}_i \cdot \nabla^M g = \frac{1}{2} [-g(\mathbf{x} + 2\mathbf{c}_i) + 5g(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i) - g(\mathbf{x} - \mathbf{c}_i) - 3g(\mathbf{x})]. \quad (5.12)$$

Como a variável calculada pela LBE semi-implícita é a função distribuição modificada, conforme definição na Eq. (4.15), o primeiro momento de  $\hat{f}_i$  não é igual à quantidade de movimento do fluido, sendo necessário considerar também a existência da força no operador de colisão, o que segundo os autores resulta em

$$\sum_i \hat{f}_i \mathbf{c}_i = \sum_i f_i \mathbf{c}_i - \frac{1}{2} \sum_i \Omega_i \mathbf{c}_i = \rho \mathbf{u} - \frac{1}{2} [\nabla^C (\rho c_s^2) - \rho \nabla^C (\mu - \kappa \nabla^2 \rho)]. \quad (5.13)$$

O índice  $C$  indica que o gradiente é calculado utilizando diferenças centrais, o que difere do esperado, uma vez que os gradientes contidos no operador de colisão utilizam diferenças misturadas.

Por meio de simulações, os autores demonstram que o método possui uma estabilidade numérica superior àquela exibida pelos modelos multifásicos existentes até então, obtendo razões de massa específica superiores a 1000. Outro ponto notável nos resultados é a ausência de correntes espúrias, até o limite de precisão da variável de ponto flutuante, para o caso de uma gota em equilíbrio.

O principal aspecto negativo deste modelo resulta da aplicação de diferentes formas de cálculo para os gradientes em (5.12), (5.11) e (5.13), o que implica na não conservação local da massa pelo operador de colisão. Conforme será abordado no Capítulo 6, esta condição tem papel central na obtenção do comportamento macroscópico do modelo e acarreta em uma incerteza quanto às equações para a massa específica e quantidade de movimento obtidas através do modelo Lee-Fischer.

A partir da aplicação do modelo, nota-se que os aspectos posi-

tivos do método de Lee & Fischer dependem fortemente da escolha da equação de estado e da forma de cálculo dos gradientes. Observa-se, por exemplo, que a substituição da equação de estado proposta pela equação de Van der Waals torna o método completamente instável.

## 6 MODELO PROPOSTO

Neste capítulo, apresenta-se o método computacional para simulação de problemas bifásicos obtido através de uma abordagem mesoscópica. Inicialmente é apresentada a derivação da equação cinética que descreve o comportamento de um fluido não-ideal em nível mesoscópico seguindo uma abordagem similar àquela de He, Shan e Doolen<sup>[58]</sup>. O comportamento macroscópico é então derivado por meio da análise de Chapman-Enskog desta equação. Com base nesta análise multiescala, são propostas versões simplificadas da equação cinética tanto para problemas isotérmicos quanto para problemas não isotérmicos. Das equações macroscópicas são derivadas relações para a espessura da interface e para a tensão superficial, sendo também analisada a consistência termodinâmica do modelo.

Por fim, as técnicas de discretização discutidas no Capítulo 4 são aplicadas para a obtenção de uma forma discreta da equação cinética, apresentado-se o esquema numérico para o cálculo dos gradientes.

### 6.1 MODELO CINÉTICO COMPLETO

Na modelagem microscópica de um gás, é razoável supor que a dinâmica do sistema possa ser descrita somente através da interação de curta distância, comumente denominada de colisão, uma vez que a distância média entre as partículas do gás é algumas ordens de grandeza maior do que o raio de ação destas partículas. Porém, quando um fluido se encontra na fase líquida, a distância média entre as moléculas diminui e a interação a longa distância deve ser incluída na descrição.

Tendo como objetivo incorporar tanto interações de curta quanto de longa distância, utiliza-se como ponto de partida a equação para a função distribuição de uma partícula da hierarquia BBGKY, Eq. (3.3), haja visto que na obtenção da hierarquia BBGKY nenhuma hipótese acerca da forma da interação intermolecular é realizada. Fazendo as substituições  $f = mNF_1$  e  $f_2 = N^2m^2F_2$ , a Eq (3.3) assume a forma

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \boldsymbol{\chi}_e = \int \nabla V(r) \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \boldsymbol{\xi}} d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2, \quad (6.1)$$

na qual o índice 1 relativo à primeira partícula foi omitido e  $\mathbf{r} \equiv \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}$ . Na relação anterior, a força que a partícula 2 exerce sobre a partícula

1 é substituída por  $-\nabla V(r)$ , na qual  $V(r)$  representa a energia potencial por unidade de massa, sendo esta uma função da distância entre as duas partículas  $r$ . O lado esquerdo da equação contém o termo de advecção da função distribuição com a adição de um termo de força externa, enquanto o lado direito representa a taxa de variação no tempo desta função em razão da força entre as partículas. Este último termo será denominado de operador de colisão por uma questão de uniformidade na notação, apesar deste considerar também a interação de longa distância.

Em geral, a interação entre as moléculas de um fluido caracteriza-se por uma forte repulsão<sup>[9]</sup> quando as partículas se encontram próximas ( $r < d$ ) e por uma atração a distâncias moderadas ( $r > d$ ), sendo  $d$  a distância em que o potencial passa de repulsivo para atrativo. Em decorrência desta característica do potencial intermolecular, torna-se útil a separação da integral contida no operador de colisão em duas regiões,

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \nabla f + \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \boldsymbol{\chi}_e = & \underbrace{\int_{r < d} \nabla V(r) \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \boldsymbol{\xi}} d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2}_{\Omega_s} \\ & + \underbrace{\int_{r > d} \nabla V(r) \cdot \frac{\partial f_2}{\partial \boldsymbol{\xi}} d\mathbf{x}_2 d\boldsymbol{\xi}_2}_{\Omega_l}. \quad (6.2) \end{aligned}$$

O termo  $\Omega_l$ , que representa os efeitos do potencial na região de atração, pode ser simplificado se a função distribuição de duas partículas não está correlacionada, ou seja,

$$f_2(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_2, t) \approx f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) f(\mathbf{x}_2, \boldsymbol{\xi}_2, t)$$

em  $r > d$ . A utilização desta hipótese embasa-se no fato da função distribuição radial  $\chi(r)$  em líquidos convergir rapidamente para o valor 1 quando  $r$  assume valores maiores que o diâmetro molecular<sup>[9, 60]</sup>. Com a referida simplificação, o termo de interação a longa distância pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\Omega_l &= \int_{r>d} \frac{\partial f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t)}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \boldsymbol{\nabla} V(r) \underbrace{\int f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) d\boldsymbol{\xi}_2 d\mathbf{x}_2}_{\rho(\mathbf{x}_2)} \\
&= \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}} \cdot \boldsymbol{\nabla} \left[ \int_{r>d} V(r) \rho(\mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_2 \right].
\end{aligned} \tag{6.3}$$

Constata-se da expressão anterior que a hipótese de não correlação resulta em um comportamento de campo médio para a região de atração o que, portanto, justifica a definição

$$V_m \equiv \int_{r>d} V(r) \rho(\mathbf{x} + \mathbf{r}) d\mathbf{r} \tag{6.4}$$

como sendo o campo médio, na qual foi aplicada a transformação de variável  $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x} + \mathbf{r}$ . Se a massa específica possui um comportamento suave, o valor desta no ponto  $\mathbf{x} + \mathbf{r}$  pode ser aproximado através de uma série de Taylor ao redor do ponto  $\mathbf{x}$ ,

$$\rho(\mathbf{x} + \mathbf{r}) = \rho(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\nabla} \rho \cdot \mathbf{r} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} \rho : \mathbf{r} \mathbf{r} + \frac{1}{6} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} \rho : \mathbf{r} \mathbf{r} \mathbf{r} + \mathcal{O}(r^4).$$

Ignorando termos de quarta ordem em  $r$ , o potencial médio pode ser aproximado pela relação

$$V_m \approx \rho \int_{r>d} V(r) d\mathbf{x}_2 + \frac{1}{2} \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{\nabla} \rho : \int_{r>d} V(r) \mathbf{r} \mathbf{r} d\mathbf{r}$$

As integrais na relação anterior representam, respectivamente, o momento de ordem zero e de segunda ordem do potencial intermolecular. Em virtude da simetria radial de  $V(r)$ , as componentes não diagonais do momento de segunda ordem são nulas e as componentes diagonais são idênticas, o que reduz o potencial médio a

$$V_m = -2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho, \tag{6.5}$$

onde os coeficientes  $a$  e  $\kappa$  são definidos na forma

$$\begin{aligned}
a &= -\frac{1}{2} \int_{r>d} V(r) d\mathbf{r}, \\
\kappa &= -\frac{1}{2D} \int_{r>d} r^2 V(r) d\mathbf{r}.
\end{aligned}$$

Tais definições têm como objetivo obter uma descrição compatível com a equação de Van der Waals e com o tensor tensão do modelo da interface difusa em (2.29).

Utilizando a aproximação anterior na expressão para  $\Omega_l$  em (6.3) e assumindo que a distribuição se encontra próxima a um equilíbrio local, ou seja,  $f \approx f^{eq}$ , chega-se à seguinte expressão para a parte atrativa do operador de colisão

$$\Omega_l = \frac{\partial f^{eq}}{\partial \xi} \cdot \nabla (-2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho) = -\frac{f^{eq}(\xi - v)}{RT} \cdot \nabla (-2a\rho - \kappa \nabla^2 \rho). \quad (6.6)$$

Conforme discutido na Seção 3.4, o operador de Enskog descreve de maneira mais adequada a repulsão de curta distância em um fluido denso, pois este considera tanto o efeito do tamanho das moléculas quanto a correlação na função distribuição conjunta  $f_2$ . Dentro deste contexto, este será utilizado para representar a parte repulsiva do operador de colisão, denotado por  $\Omega_s$ .

Na Eq. (3.13), que apresenta uma versão simplificada do operador de Enskog, o termo  $\Omega_b$  representa o operador de colisão no limite em que o tamanho da partícula é desprezível. Consequentemente, este deve ser substituído pelo operador de colisão de Boltzmann ou uma forma simplificada deste. Neste trabalho, utilizar-se-á o operador BGK para representar  $\Omega_b$ , entretanto outros operadores podem ser utilizados<sup>[36, 37]</sup>. Esta opção se deve à simplicidade deste operador, assim como à sua fácil incorporação ao LB. Com esta imposição, o operador de colisão, que é resultado da soma  $\Omega_s + \Omega_l$ , assume a forma

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{f - f^{eq}}{\tau} + \frac{f^{eq}(\xi - v)}{\rho RT} \cdot [\nabla (-\rho^2 b \chi RT + a\rho^2) + \rho \nabla (\kappa \nabla^2 \rho)] \\ & - b\rho \chi f^{eq} \left\{ \frac{3}{5} \left[ \frac{|\xi - v|^2}{2RT} + \frac{D+2}{2} \right] (\xi - v) \cdot \nabla \ln T \right. \\ & \left. + \frac{1}{D+2} \left[ \frac{(\xi - v)(\xi - v)}{RT} - \bar{I} \right] : [\nabla v + \nabla^T v + (\nabla \cdot v) \bar{I}] \right\}, \end{aligned} \quad (6.7)$$

no qual alguns termos foram rearranjados com o objetivo de facilitar simplificações e análises posteriores. Convém denominar a combinação da Eq. (6.7) com o operador da relação anterior de modelo bifásico completo. Conforme será demonstrado na próximas seções, este mo-



delo mesoscópico resulta em equações macroscópicas compatíveis com aquelas do modelo da interface difusa, porém é possível simplificá-lo sem comprometer o comportamento do modelo em escala macroscópica.

## 6.2 ANÁLISE MULTI-ESCALA

Sendo a modelagem de problemas macroscópicos o objetivo principal do trabalho, torna-se imprescindível a determinação do comportamento dinâmico do fluido nesta escala. Dessa forma, verifica-se a compatibilidade com expressões já conhecidas, o que, por sua vez, permite relacionar os parâmetros do modelo com propriedades macroscópicas do fluido.

A análise multiescala visa compreender a influência dos fenômenos em escala mesoscópica na dinâmica macroscópica do fluido, podendo esta ser realizada através da análise de Chapman-Enskog<sup>[61]</sup> ou, no caso de modelos discretos, pelo método da expansão em série de Taylor<sup>[10]</sup>. Neste trabalho optou-se por utilizar o método de Chapman-Enskog em razão da sua extensa utilização na literatura, tanto para equações contínuas como discretas.

Criada no início do século XX de forma independente por Sydney Chapman e David Enskog, o procedimento de Chapman-Enskog consiste em identificar as escalas espaciais e temporais em que cada fenômeno ocorre, o que permite separar, de acordo com a ordem de grandeza, a influência de cada termo no comportamento do fluido.

De modo geral, a equação de transporte da função distribuição pode ser escrita na forma,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nabla} f = \Omega \quad (6.8)$$

onde  $\Omega$  representa o operador de colisão, incluindo neste também o termo de força externa.

De forma a distinguir a ordem de grandeza de cada termo, a relação anterior é adimensionalizada<sup>1</sup> associando a variação temporal de  $f$  com um tempo característico macroscópico  $\mathcal{T}$  e a variação no espaço a um comprimento macroscópico  $\mathcal{L}$ . Estas associações permitem definir as derivadas adimensionais  $\boldsymbol{\nabla}^* = \mathcal{L}\boldsymbol{\nabla}$  e  $\partial/\partial t^* = \mathcal{T}\partial/\partial t$ . À velocidade molecular  $\boldsymbol{\xi}$ , associa-se um comprimento  $h$  e um tempo  $\delta$  em escala

---

<sup>1</sup>O índice \* em uma variável anteriormente definida indicará a versão adimensional da referida variável

microscópica, o que resulta na velocidade adimensional  $\boldsymbol{\xi}^* = (\delta/h)\boldsymbol{\xi}$ . Os parâmetros  $h$  e  $\delta$  podem ser interpretados, respectivamente, como o livre caminho médio e o tempo médio entre duas colisões sucessivas. Multiplicando a Eq. (6.8) por  $\delta$  e utilizando estas definições obtém-se a relação:

$$\frac{\delta}{\mathcal{T}} \frac{\partial f}{\partial t^*} + \frac{h}{\mathcal{L}} \boldsymbol{\xi}^* \cdot \nabla^* f = \delta \Omega \quad (6.9)$$

O parâmetro que separa as diferentes ordens que contribuem para a evolução da função distribuição é o número de Knudsen definido como

$$\text{Kn} = \frac{h}{\mathcal{L}} \approx \frac{\delta}{\mathcal{T}}$$

o que permite escrever a Eq. (6.9) como

$$\text{Kn} \left( \frac{\partial f}{\partial t^*} + \boldsymbol{\xi}^* \cdot \nabla^* f \right) = \delta \Omega. \quad (6.10)$$

Objetivando a derivação das equações macroscópicas até uma ordem desejada do número de Knudsen de forma sistemática, expande-se a função distribuição e a derivada no tempo como séries de potência do número de Knudsen

$$f = \sum_{n=0}^{\infty} \text{Kn}^n f^{(n)} = f^{(0)} + \text{Kn} f^{(1)} + \text{Kn}^2 f^{(2)} + \dots, \quad (6.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t^*} = \sum_{n=0}^{\infty} \text{Kn}^n \partial_n^* = \partial_0^* + \text{Kn} \partial_1^* + \text{Kn}^2 \partial_2^* + \dots \quad (6.12)$$

Na análise de Chapman-Enskog, considera-se que  $f^{(0)} = f^{eq}$ , ou seja, que a função distribuição em ordem zero de Knudsen é a distribuição de equilíbrio de Maxwell-Boltzmann calculada com as grandezas macroscópicas locais. Esta distribuição é referida também como distribuição de equilíbrio local.

Neste trabalho utilizou-se também a expansão do operador de colisão de modo a generalizar a análise,

$$\delta \Omega = \sum_{n=0}^{\infty} \text{Kn}^n \Omega^{(n)} = \Omega^{*(0)} + \text{Kn} \Omega^{*(1)} + \text{Kn}^2 \Omega^{*(2)} + \dots \quad (6.13)$$

A substituição das expansões contidas nas Eqs. (6.11), (6.12), (6.13) na Eq. (6.10), juntamente com a separação das diferentes ordens do número de Knudsen, resultam nas seguintes equações para as primeiras ordens

$$0 = \Omega^{(0)}, \quad (6.14)$$

$$\partial_0 f^{(0)} + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nabla} f^{(0)} = \Omega^{(1)}, \quad (6.15)$$

$$\partial_1 f^{(0)} + \partial_0 f^{(1)} + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nabla} f^{(1)} = \Omega^{(2)}, \quad (6.16)$$

$$\partial_2 f^{(0)} + \partial_1 f^{(1)} + \partial_0 f^{(2)} + \boldsymbol{\xi} \cdot \boldsymbol{\nabla} f^{(2)} = \Omega^{(3)}.. \quad (6.17)$$

onde as grandezas nas equações anteriores foram escritas novamente na forma dimensional, uma vez que o objetivo da adimensionalização, que é separar as diferentes ordens de Knudsen, já foi realizado.

Com o intuito de obter uma notação mais compacta, emprega-se na análise a notação

$$\langle g(\boldsymbol{\xi}) \rangle \equiv \int g(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi},$$

para indicar a integral sobre todo o espaço das velocidades. Adicionalmente, nesta análise inicial, realizar-se-á uma única hipótese a respeito do comportamento do operador de colisão, a de que este operador conserva localmente a massa, o que pode ser expressado matematicamente pela Eq. (3.8). Consequentemente, os termos da expansão do operador devem também obedecer a esta imposição, ou seja,

$$\int \Omega^{(n)} d\boldsymbol{\xi} = \langle \Omega^{(n)} \rangle = 0.$$

As equações macroscópicas são então obtidas através do cálculo dos momentos das Eqs. (6.15) e (6.16), *i.e.*, por meio da integral no espaço das velocidades destas relações. O momento de ordem zero destas equações fornece as relações para evolução da massa específica,

$$\partial_0 \rho + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (6.18)$$

$$\partial_1 \rho = 0. \quad (6.19)$$

Multiplicando as Eqs. (6.15) e (6.16) por  $\boldsymbol{\xi}$  e integrando sobre o

espaço das velocidades, obtém-se o momento de primeira ordem de tais relações

$$\partial_0(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho\mathbf{v}\mathbf{v}) + \nabla(\rho RT) = \langle \Omega^{(1)} \boldsymbol{\xi} \rangle, \quad (6.20)$$

$$\partial_1(\rho\mathbf{v}) + \nabla \cdot \langle f^{(1)} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} \rangle = \langle \Omega^{(2)} \boldsymbol{\xi} \rangle, \quad (6.21)$$

que correspondem as equações para a quantidade de movimento. Como o tensor  $\langle f^{(1)} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} \rangle$  representa um fluxo microscópico de quantidade de movimento, este estará relacionado com o tensor tensão viscosa, sendo que a forma final deste tensor dependerá da especificação do operador de colisão.

Por fim, a equação da energia total é obtida multiplicando as equações de primeira e segunda ordem em Knudsen por  $\xi^2/2$  e integrando sobre o espaço das velocidades, o que resulta nas expressões

$$\begin{aligned} \partial_0 \left( \frac{\rho v^2}{2} + \frac{D\rho RT}{2} \right) + \nabla \cdot \left( \rho \frac{v^2}{2} \mathbf{v} + \frac{D}{2} \rho RT \mathbf{v} \right) \\ + \nabla \cdot (\rho RT \mathbf{v}) = \frac{1}{2} \langle \Omega^{(1)} \xi^2 \rangle, \end{aligned} \quad (6.22)$$

$$\partial_1 \left( \frac{\rho v^2}{2} + \frac{D\rho RT}{2} \right) + \nabla \cdot \left\langle f^{(1)} \frac{\xi^2 \boldsymbol{\xi}}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \langle \Omega^{(2)} \xi^2 \rangle. \quad (6.23)$$

onde o momento  $\left\langle f^{(1)} \frac{\xi^2 \boldsymbol{\xi}}{2} \right\rangle$  representa um fluxo de energia e estará relacionado ao fluxo difusivo de calor e ao trabalho realizado pelo tensor viscoso. Sendo o objetivo a determinação da evolução da energia interna, extrai-se a contribuição da energia cinética macroscópica das relações anteriores, o que é realizado fazendo o produto escalar das Eqs. (6.20) e (6.21) com a velocidade macroscópica  $\mathbf{v}$  e subtraindo as expressões resultantes das Eqs. (6.22) e (6.23), respectivamente. Tal procedimento tem como resultado as expressões

$$\partial_0 \left( \frac{D\rho RT}{2} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{D}{2} \rho RT \mathbf{v} \right) + (\rho RT) \nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{2} \left\langle \Omega^{(1)} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2 \right\rangle, \quad (6.24)$$

$$\partial_1 \left( \frac{D\rho RT}{2} \right) + \nabla \cdot \left\langle f^{(1)} \frac{\xi^2 \boldsymbol{\xi}}{2} \right\rangle - \mathbf{v} \cdot \nabla \langle f^{(1)} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \Omega^{(2)} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2 \right\rangle. \quad (6.25)$$

Observa-se nas equações anteriores que a derivação do comportamento macroscópico depende tanto dos momentos do operador de colisão quanto dos momentos da distribuição  $f^{(1)}$ . Ainda que o cálculo destes momentos requeira a especificação do operador de colisão, algumas relações gerais podem ser obtidas que simplificam a derivação desses momentos.

Independente do operador de colisão empregado, a Eq. (6.15) fornece uma relação para  $\Omega^{(1)}$  da qual os momentos destes podem ser obtidos quando assume-se que  $f^{(0)}$  corresponde a distribuição de Maxwell-Boltzmann, o que após algumas simplificações resulta nas relações

$$\begin{aligned} \left\langle \Omega^{(1)} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \right\rangle = & \rho RT \left[ \nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v} - \frac{2}{D} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\mathbf{I}} \right] \\ & + \frac{1}{D} \left\langle \Omega^{(1)} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2 \right\rangle \bar{\mathbf{I}}, \end{aligned} \quad (6.26)$$

$$\frac{1}{2} \langle \Omega^{(1)} (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2 (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \rangle = \frac{(D+2)}{2} \rho R^2 T (\nabla T) + \frac{(D+2)}{2} RT \langle \Omega^{(1)} \boldsymbol{\xi} \rangle. \quad (6.27)$$

As relações aqui descritas podem ser utilizadas na obtenção das equações macroscópicas de qualquer modelo que utilize a Eq. (6.8), desde que o operador de colisão conserve localmente a massa, sendo portanto um resultado bastante geral.

### 6.2.1 Análise do Modelo Completo

Conforme abordado na seção anterior, a obtenção de expressões fechadas para as equações macroscópicas depende da especificação do operador de colisão. Desta forma, realiza-se a expansão em Knudsen do operador obtido para fluidos não-ideais em (6.7), por meio da expansão

da própria função da distribuição e da adimensionalização, o que resulta em

$$\begin{aligned}
\Omega^{(1)} = & -\frac{f^{(1)}}{\tau} + \frac{f^{eq}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})}{\rho RT} \cdot [\boldsymbol{\nabla}(-\rho^2 b \chi RT + a \rho^2) + \rho \boldsymbol{\nabla}(\kappa \nabla^2 \rho)] \\
& - b \rho \chi f^{eq} \left\{ \frac{3}{5} \left[ \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2}{2RT} + \frac{D+2}{2} \right] (\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \ln T \right. \\
& \left. + \frac{2}{D+2} \left[ \frac{(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})}{RT} : \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v} + \left( \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2}{2RT} - \frac{D+2}{2} \right) \boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v} \right] \right\} \\
\Omega^{(n)} = & -\frac{f^{(n)}}{\tau} \quad \forall \quad n \geq 2
\end{aligned} \tag{6.28}$$

O processo de adimensionalização, assim como a separação das diferentes ordens de Knudsen, depende da atribuição de comprimentos e tempos característicos a cada grandeza, o que é muitas vezes arbitrário. Por este motivo, alguns autores<sup>[10]</sup> diferem quanto à incorporação do termo  $\rho \boldsymbol{\nabla}(\kappa \nabla^2 \rho)$  como primeira ordem em Knudsen. Nesta análise, utilizou-se do argumento, demonstrado na próxima seção, de que em uma interface em equilíbrio este termo deve anular o termo  $\boldsymbol{\nabla}(-\rho^2 b \chi RT + a \rho^2)$ , logo os dois termos devem pertencer inevitavelmente à mesma ordem.

Utilizando a forma da distribuição de Maxwell-Boltzmann em (3.11), é possível mostrar que os momentos de primeira, segunda e terceira ordem de  $\Omega^{(1)}$  resultam nas expressões,

$$\langle \Omega^{(1)} \boldsymbol{\xi} \rangle = \boldsymbol{\nabla}(-\rho^2 b \chi RT + a \rho^2) + \rho \boldsymbol{\nabla}(\kappa \nabla^2 \rho), \tag{6.29}$$

$$\begin{aligned}
\langle \Omega^{(1)}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \rangle = & -\frac{1}{\tau} \langle f^{(1)} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} \rangle \\
& - \frac{2\rho^2 b \chi RT}{D+2} \left[ \boldsymbol{\nabla} \mathbf{v} + \boldsymbol{\nabla}^T \mathbf{v} + (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{v}) \bar{\mathbf{I}} \right], \tag{6.30}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \langle \Omega^{(1)}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})^2(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}) \rangle = & -\frac{1}{\tau} \left[ \frac{1}{2} \langle f^{(1)} \xi^2 \boldsymbol{\xi} \rangle - \langle f^{(1)} \boldsymbol{\xi} \boldsymbol{\xi} \rangle \cdot \mathbf{v} \right] \\
& + \frac{(D+2)}{2} RT \langle \Omega^{(1)} \boldsymbol{\xi} \rangle - \frac{3}{5} b \rho^2 \chi \frac{(D+2)}{2} R^2 T \boldsymbol{\nabla} T. \tag{6.31}
\end{aligned}$$

Tanto a Eq. (6.26) quanto a (6.30) fornecem expressões para o

segundo momento de  $\Omega^{(1)}$ , conseqüentemente, igualando ambas tem-se uma relação para o fluxo microscópico de quantidade de movimento em primeira ordem do número de Knudsen

$$\langle f^{(1)} \xi \xi \rangle = \rho R T \tau \left( 1 + \frac{2\rho b \chi}{D+2} \right) \left[ \frac{2}{D} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\bar{I}} - \nabla \mathbf{v} - \nabla^T \mathbf{v} \right]. \quad (6.32)$$

De modo semelhante, a expressão final para o fluxo de energia em primeira ordem de Knudsen pode ser obtido da igualdade entre as Eqs. (6.27) e (6.31),

$$\frac{1}{2} \langle f^{(1)} \xi^2 \xi \rangle = \langle f^{(1)} \xi \xi \rangle \cdot \mathbf{v} - \rho R^2 T \tau \left( 1 + \frac{3}{5} b \rho \chi \right) \nabla T. \quad (6.33)$$

#### 6.2.1.1 Balanço de Massa

Ignorando termos da ordem de  $\text{Kn}^2$ , a taxa de variação no tempo pode ser aproximada como  $\partial/\partial t \approx \partial_0 + \partial_1$ . Esta aproximação combinada às Eqs. (6.18) e (6.19) resulta em

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (6.34)$$

que é a equação da continuidade. No procedimento que culminou nesta equação, foi utilizada somente a imposição da conservação da massa pelo operador de colisão, ou seja,  $\langle \Omega \rangle = 0$ . Logo, o resultado contido na expressão anterior é bastante geral, sendo comum a todos os operadores que cumprirem este requisito.

#### 6.2.1.2 Balanço da Quantidade de Movimento

Aplicando a aproximação  $\partial/\partial t \approx \partial_0 + \partial_1$  nas equações para a quantidade de movimento em (6.20) e (6.21), juntamente com as expressões para os momento de  $\Omega^{(1)}$  e  $f^{(1)}$ , obtém-se a equação para evolução da quantidade de movimento,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = & - \nabla \left[ \rho RT(1 + b\rho\chi) - a\rho^2 \right] \\
& + \nabla \cdot \left\{ \eta \left[ \nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v} - \frac{2}{D}(\nabla \cdot \mathbf{v})\bar{\bar{\mathbf{I}}} \right] \right\} \\
& + \nabla \cdot \left[ \kappa \rho \nabla^2 \rho \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \bar{\bar{\mathbf{I}}} - \kappa (\nabla \rho)(\nabla \rho) \right]
\end{aligned} \tag{6.35}$$

onde a viscosidade absoluta do fluido é identificada como

$$\eta = \rho RT \tau \left( 1 + \frac{2}{D+2} \rho b \chi \right).$$

De modo a compatibilizar o resultado da análise com o conjunto de equações já conhecidas para o modelo da interface difusa, o termo  $\rho \nabla(\kappa \nabla^2 \rho)$ , originário do potencial médio e contido no momento  $\langle \Omega^{(1)} \xi \rangle$ , foi reescrito na forma

$$\rho \nabla(\kappa \nabla^2 \rho) = \nabla \cdot \left[ \kappa \rho \nabla^2 \rho \bar{\bar{\mathbf{I}}} + \frac{\kappa}{2} |\nabla \rho|^2 \bar{\bar{\mathbf{I}}} - \kappa \nabla \rho \nabla \rho \right].$$

Observa-se que a Eq. (6.35) apresenta um tensor tensão compatível com aquele esperado de um fluido newtoniano, Eq. (2.3), onde a pressão termodinâmica é dada por

$$p = \rho RT(1 + b\rho\chi) - a\rho^2. \tag{6.36}$$

Na relação anterior, a forma da função  $\chi$  pode ser ajustada de modo a obter o comportamento descrito por uma dada EOS. Observa-se também que a equação resultante para a quantidade de movimento é compatível com o modelo da interface difusa, pois apresenta todos os termos presentes na Eq. (2.29).

### 6.2.1.3 Balanço da Energia Interna

Unindo as Eqs. (6.24) e (6.25) obtém-se uma aproximação para a energia, que em conjunto com os momentos das Eqs. (6.30), (6.32) e (6.33) assume a forma



$$\begin{aligned} \partial_t \left( \frac{D\rho RT}{2} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{D}{2} \rho RT \mathbf{v} \right) &= \nabla \cdot [k \nabla T] - [\rho RT(1 + \rho b\chi)] \nabla \cdot \mathbf{v} \\ &+ \eta \left[ \nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v} - \frac{2}{D} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\mathbf{I}} \right] : \nabla \mathbf{v}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

onde a condutividade térmica é dada por

$$k = \rho R^2 T \tau \left( 1 + \frac{3}{5} b \rho \chi \right).$$

Uma aparente inconsistência pode ser detectada na Eq. (6.37) visto que o termo que representa o trabalho realizado pela pressão não possui a forma esperada, ou seja,

$$\rho RT(1 + \rho b\chi) \nabla \cdot \mathbf{v} \neq p \nabla \cdot \mathbf{v}.$$

Como já apontado por He e Doolen<sup>[9]</sup>, esta discrepância se deve a uma identificação equivocada da energia interna como sendo composta somente pela energia cinética das partículas. Em razão da existência de interações a longa distância, a energia interna será composta da soma da energia cinética com a energia potencial, consequentemente,

$$\rho e = \frac{1}{2} \int f |\boldsymbol{\xi} - \mathbf{u}|^2 d\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{2} \rho V_m \quad (6.38)$$

$$= \frac{D}{2} \rho RT - a \rho^2 - \frac{\kappa}{2} \rho \nabla^2 \rho \quad (6.39)$$

O último termo contido na expressão anterior considera não homogeneidades na energia interna, ou seja, este termo é responsável por incorporar a energia contida na interface. Na Seção 2.3, foi obtida uma relação para a energia interna sem os termos não homogêneos, expressa na Eq. (2.31). De forma a comparar estas relações, a energia interna por unidade de massa considerando somente termos homogêneos é identificada como

$$e_0 = \frac{D}{2} RT - a \rho$$

Calculando a derivada material desta quantidade tem-se

$$\rho \frac{de_0}{dt} = \rho \frac{d}{dt} \left( \frac{D}{2} RT \right) - a \rho \frac{d\rho}{dt}.$$

O primeiro termo do lado direito pode ser substituído utilizando a Eq. (6.37), já a derivada material da massa específica pode ser associada ao divergente da velocidade através da equação da continuidade, o que resulta em

$$\begin{aligned} \rho \frac{de_0}{dt} = & \nabla \cdot [k \nabla T] - [\rho RT(1 + \rho b\chi) - a\rho^2] \nabla \cdot \mathbf{v} \\ & + \eta \left[ \nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v} - \frac{2}{D} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\mathbf{I}} \right] : \nabla \mathbf{v} \end{aligned} \quad (6.40)$$

que é idêntica a Eq. (2.31), o que demonstra a compatibilidade da evolução da energia com o modelo da interface difusa.

### 6.3 MODELO ISOTÉRMICO SIMPLIFICADO

Em geral, na construção de um método numérico busca-se a formulação mais simples que descreva o fenômeno de interesse. Dentro deste contexto, discute-se nesta seção as simplificações que podem ser realizadas ao operador completo sem comprometer o comportamento macroscópico, objetivando a obtenção de uma forma discreta mais simples e eficiente para o tratamento de problemas isotérmicos.

Observa-se na Eq. (6.7) que a primeira simplificação a ser realizada no operador completo é a eliminação do termo proporcional a  $\nabla \ln T$ , pois este será nulo no caso isotérmico.

Adicionalmente, a análise multiescala apresentada na seção anterior permite observar a influência que cada um dos termos do operador de colisão completo possui nas equações macroscópicas. Em especial, constata-se que o último termo do operador completo, que é proporcional ao gradiente da velocidade, afeta as equações macroscópicas em dois pontos distintos. O primeiro ponto é a alteração do valor da viscosidade do fluido, que sem a presença deste termo teria o valor

$$\eta = \rho RT \tau. \quad (6.41)$$

O segundo ponto é assegurar que a pressão contida na equação da energia corresponda à equação de estado do fluido não-ideal, contida em (6.36).

No modelo isotérmico, a equação da energia não é necessária, uma vez que considera-se a temperatura constante. Neste caso, o único efeito da eliminação dos termos proporcionais a  $\nabla \mathbf{v}$  e  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  será a al-

teração do valor da viscosidade. Tal mudança na relação para  $\eta$  não é significativa, visto que em LB não é o objetivo recuperar os coeficientes de transporte em função dos parâmetros microscópicos, sendo necessário somente que tais coeficientes possam ser ajustados.

Ignorando os termos proporcionais a  $\nabla \ln T$ ,  $\nabla \mathbf{v}$  e  $\nabla \cdot \mathbf{v}$  na Eq. (6.7), tem-se o operador de colisão simplificado para problemas isotérmicos,

$$\Omega = -\frac{f - f_{eq}}{\tau} + \frac{f^{eq}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})}{\rho RT} \cdot [\nabla(\rho RT - p) + \rho \nabla(\kappa \nabla^2 \rho)]. \quad (6.42)$$

no qual utilizou-se que  $\rho RT - p = -\rho^2 b \chi RT + a \rho^2$ , o que pode ser constatado da relação (6.36). Ressalta-se que este operador resulta nas mesmas relações para o balanço de massa e quantidade de movimento que o operador completo, diferindo somente na relação para a viscosidade, que neste caso é dada por (6.41).

## 6.4 MODELO TÉRMICO SIMPLIFICADO

De modo análogo ao realizado para problemas isotérmicos, no caso onde a evolução do campo de temperatura precisa ser determinada, pode-se também simplificar o operador completo sem prejuízos à descrição macroscópica. Entretanto, neste caso não é possível descartar o termo  $\nabla \ln T$  sob a justificativa de que este será nulo. Porém, o procedimento de Chapman-Enskog permite observar que este gradiente afeta somente o terceiro momento de  $\Omega^{(1)}$  e este por sua vez é utilizado apenas no cálculo do fluxo difusivo de energia  $\langle f^{(1)} \xi^2 \boldsymbol{\xi} \rangle$ . Utilizando esta constatação, demonstra-se que a alteração, decorrente da negligência do termo proporcional  $\nabla \ln T$  no operador de colisão, está restrita a modificar o valor da condutividade térmica. Consequentemente, ignorando o termo citado, a condutividade térmica assume a forma

$$k = \rho R^2 T \tau.$$

Como já argumentado para o modelo isotérmico, tal alteração não impacta significativamente no comportamento macroscópico, uma vez que a forma geral da equação da energia permanece inalterada.

Conforme discutido na seção anterior, os termos proporcionais ao gradiente e ao divergente da velocidade no operador de colisão são

necessários para que a equação de estado presente no balanço da energia, em (6.40), corresponda à mesma relação para a pressão encontrada no balanço de quantidade de movimento. Todavia, apesar destes não poderem ser simplesmente desprezados no caso de problemas não isotérmicos, é possível demonstrar que estes podem ser simplificados. De modo a compreender tal simplificação, nota-se que um tensor qualquer de segunda ordem  $\bar{\bar{A}}$  pode sempre ser decomposto em um tensor esférico mais um tensor de traço nulo<sup>[62]</sup> na forma

$$\bar{\bar{A}} = \frac{1}{D} \text{Tr}(A) \bar{\bar{I}} + \left[ \bar{\bar{A}} - \frac{1}{D} \text{Tr}(A) \bar{\bar{I}} \right].$$

Aplicando tal decomposição ao tensor relacionado ao gradiente da velocidade, contido no último termo do operador completo em (6.7), tem-se

$$\nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v} + (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\bar{I}} = \underbrace{\frac{D+2}{D} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\bar{I}}}_{\text{Comp. Esférica}} + \underbrace{\left[ \nabla \mathbf{v} + \nabla^T \mathbf{v} - \frac{2}{D} (\nabla \cdot \mathbf{v}) \bar{\bar{I}} \right]}_{\text{Comp. de Traço Nulo}}$$

Por meio da análise de Chapman-Enskog, é possível demonstrar que a componente esférica afeta somente a equação da energia, enquanto a componente de traço nulo afeta apenas o valor da viscosidade. Logo, ao desprezar a componente de traço nulo, modifica-se unicamente a relação para viscosidade que assume a forma  $\eta = \rho RT \tau$ , mantendo a forma geral das equações macroscópicas.

Desprezando a componente citada e os termos proporcionais à  $\nabla \ln T$  no operador completo em (6.7), tem-se o operador simplificado para problemas térmicos na forma,

$$\begin{aligned} \Omega = & -\frac{f - f_{eq}}{\tau} + \frac{f^{eq}(\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v})}{\rho RT} \cdot [\nabla (\rho RT - p) + \rho \nabla (\kappa \nabla^2 \rho)] \\ & + \frac{f^{eq}}{D \rho RT} \left[ \frac{|\boldsymbol{\xi} - \mathbf{v}|^2}{RT} - D \right] \left[ \rho RT - T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho} \right] (\nabla \cdot \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (6.43)$$

Na equação anterior realizou-se a identificação,

$$a\rho^2 = p - T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_{\rho},$$

com o objetivo de generalizar o resultado em função de uma equação de estado qualquer  $p(\rho, T)$ . Com tal substituição, o fluido descrito pela aplicação da Eq. (6.43) possuirá uma energia interna descrita pela expressão diferencial,

$$de_0 = \frac{D}{2} R dT + \frac{1}{\rho^2} \left[ p - T \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] d\rho.$$

## 6.5 COMPORTAMENTO DA INTERFACE

O conhecimento detalhado do comportamento da interface é de especial interesse tanto do ponto de vista de aplicações, uma vez que este permite controlar a espessura da interface e a tensão interfacial, quanto sob o aspecto da análise do modelo, o que possibilita encontrar possíveis fontes de erros na forma discreta.

Matematicamente, este comportamento é descrito pelo perfil de massa específica na direção perpendicular à interface. Este perfil pode ser obtido por meio do balanço de quantidade de movimento em (6.35), juntamente com a condição de que a interface se encontra no equilíbrio, o que resulta na expressão

$$\frac{d}{dz} \left[ -p + \kappa \rho \frac{d^2 \rho}{dz^2} - \frac{\kappa}{2} \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2 \right] = 0, \quad (6.44)$$

na qual considerou-se que a interface é paralela aos eixos  $x$  e  $y$ , portanto somente as variações em  $z$  são não nulas. A condição de contorno para a equação anterior é obtida considerando que as fases líquida e vapor encontram-se, respectivamente, no lado direito e esquerdo do plano  $xy$ , ou seja,  $\rho \rightarrow \rho_v$  quando  $z \rightarrow -\infty$  e  $\rho \rightarrow \rho_l$  quando  $z \rightarrow +\infty$ .

Da relação em (6.44), conclui-se que a função no interior da derivada é constante, o que em conjunto com a condição de contorno resulta na equação

$$p - \kappa \rho \frac{d^2 \rho}{dz^2} + \frac{\kappa}{2} \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2 = p_{eq}, \quad (6.45)$$

visto que no interior das fases,  $z \rightarrow \pm\infty$ , a taxa de variação da massa específica é nula e a pressão iguala-se ao valor de saturação  $p_{eq} \equiv p(\rho_l) = p(\rho_v)$ .

A equação diferencial não linear contida em (6.45) pode ser convenientemente reescrita utilizando a transformação,

$$y \equiv \frac{\kappa}{2} \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2, \quad (6.46)$$

$$\frac{dy}{d\rho} = \frac{\kappa}{2} \left( 2 \frac{d\rho}{dz} \right) \left[ \frac{d}{dz} \left( \frac{d\rho}{dz} \right) \right] \frac{dz}{d\rho} = \kappa \frac{d^2\rho}{dz^2}.$$

que resulta na equação linear,

$$\rho \frac{dy}{d\rho} - y = p - p_{eq}.$$

A solução geral desta equação diferencial pode ser facilmente obtida dividindo ambos os lados por  $\rho^2$  e integrando a expressão resultante sobre o intervalo  $[\rho_v, \rho]$ ,

$$y(\rho) = \rho \int_{\rho_v}^{\rho} [p(\rho') - p_{eq}] \frac{d\rho'}{\rho'^2} + \frac{\rho}{\rho_v} y(\rho_v).$$

Da condição de contorno para o perfil de massa específica, tem-se que  $d\rho/dz \rightarrow 0$  quando  $\rho \rightarrow \rho_v$  ou  $\rho \rightarrow \rho_l$ , conseqüentemente, decorre da definição da função  $y$  em (6.46) que  $y(\rho_v) = y(\rho_l) = 0$ . Impondo a condição de contorno  $y(\rho_v) = 0$  na solução geral contida na relação anterior, chega-se à solução particular,

$$y(\rho) = \rho \int_{\rho_v}^{\rho} [p(\rho') - p_{eq}] \frac{d\rho'}{\rho'^2}.$$

Analisando esta expressão, observa-se ausência de uma constante que permita a imposição da segunda condição de contorno  $y(\rho_l) = 0$ . Portanto, uma solução para a equação original em (6.44) que cumpra as condições de contorno esperadas para um perfil de massa específica só existirá se,

$$\int_{\rho_v}^{\rho_l} [p(\rho') - p_{eq}] \frac{d\rho'}{\rho'^2} = 0 \quad (6.47)$$

A relação anterior é precisamente a regra das áreas ou construção de Maxwell<sup>[63]</sup>. Logo, é possível afirmar que a coexistência entre as fases implica diretamente no cumprimento da regra das áreas de Maxwell ou, equivalentemente, na igualdade entre os potenciais químicos.

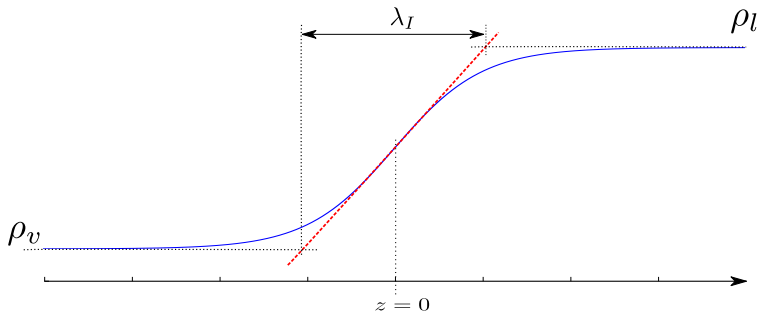
Esta conclusão é particularmente importante pois revela que a inconsistência termodinâmica para um determinado modelo discreto é consequência direta da existência de termos espúrios na equação para o balanço da quantidade de movimento, já que a equação exata em (6.35)

implica no cumprimento das regras impostas pela termodinâmica.

Invertendo a definição da função  $y(\rho)$  em (6.46) é possível obter o perfil de massa específica na interface utilizando a integral,

$$z = \sqrt{\frac{\kappa}{2}} \int_{\rho_{med}}^{\rho} \frac{d\rho'}{\sqrt{y(\rho')}}. \quad (6.48)$$

Por uma questão de praticidade, optou-se por definir que a interface está centrada em  $z = 0$ , ou seja, que o ponto de massa específica média  $\rho_{med} \equiv 1/2(\rho_l + \rho_v)$  se encontra na origem do eixo  $z$ .



**Figura 11:** Ilustração da definição da espessura da interface  $\lambda_I$  através da taxa de variação da massa específica no centro da interface.

Como mencionado anteriormente, uma das grandezas de interesse é a espessura da interface, já que em aplicações busca-se ajustar os parâmetros de modo a obter uma interface delgada. A definição natural para esta grandeza seria  $z(\rho_l) - z(\rho_v)$ , entretanto esta definição diverge já que estas massas específicas ocorrem somente quando  $z \rightarrow \pm\infty$ . Uma das abordagens comumente utilizadas é definir a interface como a distância entre pontos com massas específicas próximas a  $\rho_v$  e  $\rho_l$ . Porém, com tal definição, a espessura da interface fica dependente dos valores de corte para estas massas específicas. De modo a contornar esta arbitrariedade e por resultar em uma forma mais simples para o cálculo da espessura da interface, neste trabalho adotou-se a abordagem apresentada na Ref. [2]. Esta definição parte da constatação de que a taxa de variação da massa específica se mantém praticamente constante ao longo da interface, conforme ilustrado na Figura 11, o que permite definir a espessura da interface através de uma aproximação

linear deste perfil, ou seja,

$$\lambda_I \equiv \left. \frac{dz}{d\rho} \right|_{z=0} (\rho_l - \rho_v) = (\rho_l - \rho_v) \sqrt{\frac{\kappa}{2y(\rho_{med})}}$$

Utilizando a definição da função adimensional  $y_r \equiv y/p_c$ , A expressão anterior pode ser convenientemente reescrita como

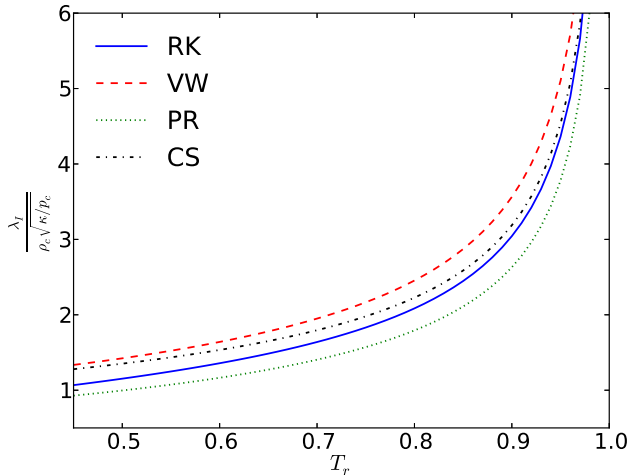
$$\lambda_I = \left( \rho_c \sqrt{\frac{\kappa}{p_c}} \right) \frac{\rho_{r,l} - \rho_{r,v}}{\sqrt{2y(\rho_{r,med})}} \quad (6.49)$$

onde  $\rho_{r,l}$  e  $\rho_{r,v}$  correspondem às massas específicas de saturação na forma reduzida.

Uma análise da Eq. (6.49) permite concluir que o parâmetro  $\rho_c \sqrt{\kappa/p_c}$  tem papel fundamental no valor da espessura da interface, haja vista que o termo restante é adimensional e função somente da temperatura reduzida. A dependência do referido termo com  $T_r$  para diferentes EOS é apresentada na Figura 12, pela qual é possível observar o rápido aumento do tamanho da interface à medida que a temperatura se aproxima do valor crítico, assim como a redução quase linear de  $\lambda_I$  com a diminuição da temperatura.

O resultado obtido para o perfil de massa específica pode ser utilizado a fim de determinar o valor da tensão superficial. Com este objetivo, faz-se uso da definição mecânica desta grandeza, que afirma que a tensão superficial corresponde à força por unidade de comprimento realizada pela interface no sentido tangencial à mesma.





**Figura 12:** Variação da espessura da interface com a temperatura para as equações de estado de Redlich-Kwong (RK), Van der Waals (VW) , Peng-Robinson (PR) e Carnahan-Starling (CS).

Aplicando esta definição<sup>[64]</sup> ao caso de uma interface plana localizada sobre o plano  $xy$  resulta na expressão

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} (T_{zz} - T_{xx}) dz, \quad (6.50)$$

onde  $T_{xx}$  é a tensão na direção tangencial a interface e  $T_{zz}$  é a tensão normal. A subtração destas duas tensões tem como objetivo eliminar qualquer contribuição isotrópica na força tangencial.

Para um sistema em equilíbrio, o tensor tensão em (6.35) se resume à pressão e aos termos associados com as variações na massa específica, que ao ser substituído em (6.50) resulta na relação,

$$\gamma = \int_{-\infty}^{+\infty} \kappa \left( \frac{d\rho}{dz} \right)^2 dz = \kappa \int_{\rho_v}^{\rho_l} \left( \frac{d\rho}{dz} \right) d\rho.$$

A solução para o perfil de massa específica obtida na seção anterior permite o cálculo da taxa de variação  $d\rho/dz$  através da função  $y(\rho)$  o que, por sua vez, possibilita o cálculo da tensão superficial através da expressão

$$\gamma = \rho_c \sqrt{\kappa p_c} \int_{\rho_{r,v}}^{\rho_{r,l}} \sqrt{2y_r(\rho_r)} d\rho_r, \quad (6.51)$$

sendo que a integral foi reescrita somente em função das variáveis reduzidas. Observa-se que o valor da integral depende somente da temperatura relativa e da EOS, consequentemente o parâmetro  $\rho_c \sqrt{\kappa p_c}$  terá papel fundamental no valor final de  $\gamma$ .

## 6.6 FORMA DISCRETA DOS MODELOS SIMPLIFICADOS

Os operadores contidos nas Eqs. (6.42) e (6.43) em conjunto com a equação cinética genérica, Eq. (6.8), representam respectivamente os modelos mínimos no contínuo para a descrição do escoamento bifásico no caso isotérmico e no caso não isotérmico. Com o intuito de obter um método computacional utilizando estas equações, nesta seção aplica-se as ferramentas apresentadas no Capítulo 4 para derivação de formas discretas das equações cinéticas.

### 6.6.1 Forma discreta do termo advectivo

Neste trabalho, para a aproximação do termo advectivo utiliza-se no mínimo a forma que possui erros de terceira ordem em  $\delta$ ,

$$\hat{f}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, t + \delta) - \hat{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \delta\Omega, \quad (6.52)$$

na qual a função distribuição modificada é dada por  $\hat{f} = f - (\delta/2)\Omega$ .

Wagner<sup>[10]</sup> demonstrou via expansão em série que o termo advectivo de segunda ordem da expressão anterior apresenta erros de alta ordem quando  $\Omega_i$  incorpora forças que envolvem elevados gradientes de massa específica. O autor mostra que tais erros afetam a consistência termodinâmica dos modelos existentes que utilizam a relação (6.52), o que é constatado pela discrepância que ocorre entre a curva de existência teórica e numérica. Com base nesta argumentação, desenvolveu-se neste trabalho uma forma discreta com erros de quarta ordem.

Esta aproximação de terceira ordem pode ser obtida da expansão em série de Taylor do termo  $f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta)$ , encontrada em (4.10), juntamente com a imposição que  $D_t f = \Omega$ , o que resulta na expressão

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \delta\Omega + \frac{\delta^2}{2}D_t\Omega + \frac{\delta^3}{6}D_t^2\Omega + \dots \quad (6.53)$$

Sendo o objetivo a elaboração de um método de terceira ordem, a aproximação realizada anteriormente para  $D_t\Omega$  em (4.13) deve ser modificada de modo a considerar também os termos de ordem  $\delta$ . Isto é realizado utilizando diferenças finitas centrais para o cálculo desta derivada

$$D_t\Omega = \frac{\Omega(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - \Omega(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t - \delta)}{2\delta} + \mathcal{O}(\delta^2). \quad (6.54)$$

A segunda derivada do operador de colisão pode ser obtida também utilizando a regra de derivadas centrais,

$$D_t^2\Omega = \frac{\Omega(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - 2\Omega(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \Omega(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t - \delta)}{\delta^2} + \mathcal{O}(\delta^2) \quad (6.55)$$

Substituindo as Eqs. (6.54) e (6.55) na expansão em série de Taylor da Eq. (6.53) e ignorando termos da ordem de  $\delta^4$ , obtém-se

$$f(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \quad (6.56)$$

$$\delta \left[ \frac{8}{12}\Omega(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) + \frac{5}{12}\Omega(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - \frac{1}{12}\Omega(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t - \delta) \right]$$

A expressão anterior é implícita já que o operador de colisão depende da função distribuição. De modo semelhante ao realizado para a forma discreta de segunda ordem, é possível transformar a equação definindo uma função distribuição modificada,

$$\tilde{f} \equiv f - \frac{5}{12}\delta\Omega,$$

que ao ser substituída na Eq. (6.56) resulta em

$$\tilde{f}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t + \delta) - \tilde{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) = \frac{13}{12}\delta\Omega(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}, t) - \frac{\delta}{12}\Omega(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t - \delta). \quad (6.57)$$

Esta nova expressão constitui somente uma pequena diferença

em relação aquela atualmente utilizada nos métodos de Boltzmann para rede, dada pela Eq. (6.52). Em termos computacionais, a utilização da relação de terceira ordem não acarreta em um aumento no tempo de computação, diferindo somente na quantidade de memória exigida. Este acréscimo resulta da necessidade de manter-se na memória o valor do operador de colisão no passo de tempo anterior, relativo ao termo  $\Omega(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}\delta, \boldsymbol{\xi}, t - \delta)$ .

Neste trabalho são utilizadas as formas discretas de segunda, Eq. (6.52), e terceira ordem, Eq. (6.57), com objetivo de investigar os argumentos apontados por Wagner<sup>[10]</sup> quanto ao surgimento de erros que acarretam uma discrepância entre resultados teóricos e numéricos.

### 6.6.2 Forma discreta no espaço de velocidades

Conforme discutido na Seção 4.3, quando a função distribuição é aproximada por uma expansão de polinômios de Hermite, as integrais ou momentos da função distribuição podem ser calculadas de forma exata através de quadraturas. Como a quadratura envolve somente o valor da função distribuição para as velocidades  $\boldsymbol{\xi}_i$ , denominadas nós da quadratura, não há necessidade em calcular a função distribuição para todo o espaço de velocidades. Logo, aplica-se as relações para evolução no tempo, contidas em (6.52) e (6.57), apenas para as velocidades  $\boldsymbol{\xi}_i$ .

De modo a compatibilizar a forma discreta resultante, utiliza-se a definição de função distribuição discreta contida na Eq. (4.20), que incorpora os pesos da quadratura na própria distribuição. Isto é obtido multiplicando as formas discretas para o termo advectivo pelo fator  $\omega_i (2\pi RT_o)^{D/2} e^{\xi_{o,i}^2/2} / \rho_0$ , o que resulta nas expressões,

$$\hat{f}_i(\mathbf{x} + h\mathbf{c}_i, t + \delta) - \hat{f}_i(\mathbf{x}, t) = \Omega_i \quad (6.58)$$

$$\tilde{f}_i(\mathbf{x} + h\mathbf{c}_i, t + \delta) - \tilde{f}_i(\mathbf{x}, t) = \frac{13}{12}\Omega_i(\mathbf{x}, t) - \frac{1}{12}\Omega_i(\mathbf{x} - h\mathbf{c}_i, t - \delta) \quad (6.59)$$

De modo a obter uma forma mais compacta, definiu-se também o operador de colisão discreto  $\Omega_i$  como

$$\Omega_i \equiv \frac{\omega_i (2\pi RT_o)^{D/2} e^{\xi_{o,i}^2/2}}{\rho_0} (\delta\Omega). \quad (6.60)$$

Aplicando esta definição ao operador de colisão do caso não-isotérmico

em (6.43) e reescrevendo o operador em termos da função distribuição modificada  $\tilde{f}_i$  obtém-se

$$\begin{aligned}\Omega_i = & \frac{\hat{f}_i - f_{eq}}{\tau^* + \frac{1}{2}} \\ & + \left( \frac{\tau^*}{\tau^* + \frac{1}{2}} \right) \left\{ a^2 \frac{f_i^{eq}(\mathbf{c}_i - \mathbf{u})}{\varrho(\Theta + 1)} \cdot \left[ \tilde{\nabla} \left( \varrho \frac{(\Theta + 1)}{a^2} - p^* \right) + \varrho \tilde{\nabla}(\kappa^* \tilde{\nabla}^2 \varrho) \right] \right. \\ & \left. + \frac{a^2 f_i^{eq}}{D \varrho(\Theta + 1)} \left[ \frac{a^2 |\mathbf{c}_i - \mathbf{u}|^2}{\Theta + 1} - D \right] \left[ \varrho \frac{(\Theta + 1)}{a^2} - T \left( \frac{\partial p^*}{\partial T} \right)_\rho \right] \tilde{\nabla} \cdot \mathbf{u} \right\},\end{aligned}\quad (6.61)$$

na qual as variáveis estão escritas na forma adimensional através das definições  $p^* \equiv p \delta^2 / (\rho_0 h^2)$ ,  $\kappa^* = (\rho_0 \delta^2 / h^4) \kappa$ ,  $\tau^* = \tau / \delta$  e  $\tilde{\nabla} = h \nabla$ . De modo similar, o operador de colisão  $\Omega_i$  reescrito em função da função distribuição modificada  $\tilde{f}_i$  assume a forma

$$\begin{aligned}\Omega_i = & - \frac{\tilde{f}_i - f_{eq}}{\tau^* + \frac{5}{12}} \\ & + \left( \frac{\tau^*}{\tau^* + \frac{5}{12}} \right) \left\{ a^2 \frac{f_i^{eq}(\mathbf{c}_i - \mathbf{u})}{\varrho(\Theta + 1)} \cdot \left[ \tilde{\nabla} \left( \varrho \frac{(\Theta + 1)}{a^2} - p^* \right) + \varrho \tilde{\nabla}(\kappa^* \tilde{\nabla}^2 \varrho) \right] \right. \\ & \left. + \frac{a^2 f_i^{eq}}{D \varrho(\Theta + 1)} \left[ \frac{a^2 |\mathbf{c}_i - \mathbf{u}|^2}{\Theta + 1} - D \right] \left[ \varrho \frac{(\Theta + 1)}{a^2} - T \left( \frac{\partial p^*}{\partial T} \right)_\rho \right] (\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \right\}.\end{aligned}\quad (6.62)$$

Como o cálculo do operador de colisão depende dos valores de  $\varrho$ ,  $u$  e  $\Theta$ , é necessário estabelecer a conexão entre tais variáveis e os momentos da função distribuição modificada. Por meio da expressão  $f_i = \tilde{f}_i + (5/12)\Omega_i$ , obtém-se então

$$\varrho = \sum_{i=0}^b \tilde{f}_i \quad (6.63)$$

$$\varrho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^b \tilde{f}_i \mathbf{c}_i + \frac{5}{12} \left[ \tilde{\nabla} \left( \varrho \frac{(\Theta + 1)}{a^2} - p^* \right) + \varrho \tilde{\nabla}(\kappa^* \tilde{\nabla}^2 \varrho) \right] \quad (6.64)$$

$$\frac{D}{2} \frac{\varrho(\Theta + 1)}{a^2} = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^b \tilde{f}_i |\mathbf{c}_i - \mathbf{u}|^2 + \frac{5}{12} \left[ \varrho \frac{(\Theta + 1)}{a^2} - T \left( \frac{\partial p^*}{\partial T} \right)_\rho \right] (\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{u}) \quad (6.65)$$

No caso da função modificada  $\hat{f}_i$ , as relações para as variáveis macroscópicas são similares as anteriores, sendo apenas o fator 5/12 substituído por 1/2. Através destas expressões é possível notar que há uma dependência nos cálculos de  $\mathbf{u}$  e  $\Theta$ , ou seja, o cálculo da velocidade demanda o conhecimento da temperatura enquanto a determinação da temperatura envolve a velocidade. Duas soluções podem ser utilizadas para contornar esta dificuldade. A primeira é a utilização dos valores do passo anterior para a determinação dos termos no lado direito da Eqs. (6.63), (6.64) e (6.65). Esta estratégia torna a forma de cálculo simples e eficiente, mas em contrapartida adiciona um erro no cálculo destes termos. A segunda solução é utilizar um processo iterativo, que demanda um custo maior mas resulta em erros menores.

A forma discreta do operador de colisão para o modelo isotérmico pode ser obtida de forma semelhante ou diretamente através da simplificação da Eq. (6.62), visto que o operador no caso isotérmico não possui o último termo do lado direito da Eq. (6.43), o que resulta em,

$$\begin{aligned} \Omega_i = & - \frac{\tilde{f}_i - f_{eq}}{\tau^* + \frac{5}{12}} \\ & + \left( \frac{\tau^*}{\tau^* + \frac{5}{12}} \right) a^2 \frac{f_i^{eq}(\mathbf{c}_i - \mathbf{u})}{\varrho} \cdot \left[ \tilde{\nabla} \left( \frac{\varrho}{a^2} - p^* \right) + \varrho \tilde{\nabla}(\kappa^* \tilde{\nabla}^2 \varrho) \right] \end{aligned} \quad (6.66)$$

onde impõe-se que  $\Theta = 0$  por um questão de conveniência. Com esta imposição, a determinação da quantidade de movimento pode ser escrita como,

$$\varrho \mathbf{u} = \sum_{i=0}^b \tilde{f}_i \mathbf{c}_i + \frac{5}{12} \left[ \tilde{\nabla} \left( \frac{\varrho}{a^2} - p^* \right) + \varrho \tilde{\nabla}(\kappa^* \tilde{\nabla}^2 \varrho) \right] \quad (6.67)$$

Diferentemente do que ocorre no modelo não-isotérmico, nota-se que neste caso as duas variáveis podem ser determinadas de forma independente.

### 6.6.3 Forma discreta dos operadores diferenciais

O operador de colisão, assim como a determinação das variáveis macroscópicas, envolve o cálculo dos operadores diferenciais gradiente, laplaciano e gradiente do laplaciano. Logo, é necessário a aplicação de uma forma discreta para estes operadores.

A aplicação do procedimento usual de diferenças finitas para a determinação destes termos resulta, na maioria dos casos, em métodos instáveis quando utilizados com o método LB. Por este motivo, opta-se por formas discretas que aproveitem a isotropia do método LB, especialmente em razão da alta ordem de isotropia das redes obtidas via abscissas prescritas.

Seja  $\phi$  uma função escalar qualquer, tem-se que a expansão em série de Taylor de  $\phi(\mathbf{r} + h\mathbf{c}_i)$  é dada por

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{r} + h\mathbf{c}_i) &= \phi(\mathbf{r}) + \tilde{\nabla}\phi \cdot \mathbf{c}_i + \frac{1}{2}\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\phi : \mathbf{c}_i\mathbf{c}_i \\ &+ \frac{1}{6}\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\phi : \mathbf{c}_i\mathbf{c}_i\mathbf{c}_i + \frac{1}{24}\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\tilde{\nabla}\phi : \mathbf{c}_i\mathbf{c}_i\mathbf{c}_i\mathbf{c}_i + \dots\end{aligned}\quad (6.68)$$

Conforme discutido na Seção 4.3, as redes e pesos obtidos através do processo de abscissas prescritas possuem como principal propriedade a capacidade de recuperar via quadratura os valores exatos das integrais de funções polinomiais até uma dada ordem  $N$ . Logo, se  $n < N$  é possível firmar que,

$$a^n \sum_{i=0}^b \omega_i \underbrace{\mathbf{c}_i\mathbf{c}_i \dots \mathbf{c}_i}_{n \text{ vezes}} = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \int e^{-\xi_o^2} \underbrace{\xi_o\xi_o \dots \xi_o}_{n \text{ vezes}} d\xi_o = \begin{cases} \bar{\bar{\mathbf{E}}}^{(n)}, & \text{se } n \text{ é par} \\ 0, & \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases}\quad (6.69)$$

onde  $\bar{\bar{\mathbf{E}}}^{(n)}$  é o tensor isotrópico de ordem  $n$ , que pode ser escrito em notação indicial na forma

$$E_{\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n}^{(n)} = \sum_{k=2}^n \delta_{\alpha_1\alpha_k} E_{\alpha_2\alpha_3\dots\alpha_{k-1}\alpha_{k+1}\dots\alpha_n}^{(n-2)}.$$

Utilizando o resultado da Eq. (6.69) e assumindo que uma rede capaz de integrar polinômios de ordem  $N = 6$  é utilizada, as quadraturas do produto entre a função  $\phi(\mathbf{r} + h\mathbf{c}_i)$  e os polinômios  $1$ ,  $\mathbf{c}_i$  e  $\mathbf{c}_i^2\mathbf{c}_i$

resultam em

$$\sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) = \phi(\mathbf{r}) + \frac{1}{2a^2} \tilde{\nabla}^2 \phi + \frac{1}{8a^4} \tilde{\nabla}^2 (\tilde{\nabla}^2 \phi) + \mathcal{O}(\tilde{\nabla}^6 \phi) \quad (6.70)$$

$$\sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) \mathbf{c}_i = \frac{1}{a^2} \tilde{\nabla} \phi + \frac{1}{2a^4} \tilde{\nabla} \tilde{\nabla}^2 \phi + \mathcal{O}(\tilde{\nabla}^5) \quad (6.71)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) c_i^2 &= \frac{D}{a^2} \phi(\mathbf{r}) + \frac{(D+2)}{2a^4} \tilde{\nabla}^2 \phi \\ &\quad + \frac{(D+4)}{8a^6} \tilde{\nabla}^2 \tilde{\nabla}^2 \phi + \mathcal{O}(\tilde{\nabla}^6) \end{aligned} \quad (6.72)$$

$$\sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) c_i^2 \mathbf{c}_i = \frac{(D+2)}{a^4} \tilde{\nabla} \phi + \frac{(D+4)}{6a^6} \tilde{\nabla} \tilde{\nabla}^2 \phi + \mathcal{O}(\tilde{\nabla}^5) \quad (6.73)$$

A partir destas equações é possível isolar expressões para o  $\nabla \phi$ , o  $\nabla^2 \phi$  e o  $\nabla \nabla^2 \phi$ , se termos da ordem  $\nabla^5$  e  $\nabla^6$  forem ignorados,

$$\tilde{\nabla} \phi \approx \frac{a^2}{2} \sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) [(D+4) - a^2 c_i^2] \mathbf{c}_i$$

$$\tilde{\nabla}(\tilde{\nabla}^2 \phi) \approx a^4 \sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) [a^2 c_i^2 - (D+2)] \mathbf{c}_i$$

$$\tilde{\nabla}^2 \phi \approx \left\{ a^2 \sum_{i=0}^b \omega_i \phi(\mathbf{r} + \mathbf{c}_i) [(4+D) - a^2 c_i^2] \right\} - 4a^2 \phi(\mathbf{r})$$

As expressões acima fornecem um modo simples e eficiente de calcular as derivadas presentes no operador de colisão, podendo ser utilizadas com qualquer rede obtida através do métodos das abscissas prescritas, desde que este seja capaz de integrar polinômios de sexto grau de forma exata, o que é o caso das redes D2V17, D3V39 utilizadas com a distribuição de equilíbrio de terceira ordem.



## 7 RESULTADOS

No capítulo anterior, discutiu-se a obtenção de formas discretas da equação cinética para fluidos não-ideais, onde dois operadores de colisão simplificados foram propostos, um para o caso isotérmico e um para o não isotérmico. Adicionalmente, uma nova forma discreta de terceira ordem para o termo advectivo foi derivada, o que amplia a acurácia deste termo em relação à forma usual da LBE, que apresenta erros de  $\delta^3$ .

De forma a validar tais modelo discretos e compreender a influência das diferentes formas discretas no comportamento macroscópico, realizou-se diversas simulações cujos resultados são expostos no presente capítulo. As simulações realizadas focam a aplicação do operador de colisão para o caso isotérmico, por razões que ficarão claras após a apresentação dos resultados e com a discussão realizada na conclusão.

Utiliza-se inicialmente o problema de uma onda estacionária para aferir o valor da velocidade do som obtidas numericamente. Esta medida tem o objetivo de verificar a incorporação das diversas EOS ao método, visto que a velocidade do som depende diretamente destas equações. Em seguida, investiga-se a questão da consistência termodinâmica do método através da obtenção da curva de coexistência líquido-vapor e da comparação dos perfis de massa específica na interface com a solução analítica, haja vista que esta é uma deficiência comum dos métodos LB para escoamento líquido-vapor. A previsão analítica para o valor da tensão superficial e a obediência à lei de Young-Laplace são investigadas através do estudo de uma gota bidimensional em equilíbrio. Por fim, o método é aplicado a dois problemas distintos. O primeiro envolve a simulação do processo de coalescência entre duas gotas, cujo resultado para o crescimento da ponte entre as duas gotas é contrastado com expressões propostas por meio de observações experimentais. O segundo caso é o surgimento de uma bolha em um meio líquido que se encontra a uma pressão abaixo do valor de saturação, onde a taxa de crescimento do raio é comparada com a relação analítica. A escolha destes problemas teve como motivação demonstrar a versatilidade do método, já que o primeiro concerne a junção de duas interfaces e o segundo a formação de uma nova interface.

Na obtenção dos resultados, a forma discreta foi empregada conjuntamente a cinco EOS diferentes, sendo estas a equação de Van der Waals (VW), de Redlich-Kwong (RK), de Redlich-Kwong-Soave (RKS), de Peng-Robinson (PR) e de Carnahan-Starling (CS) cujas expressões

e relações para os pontos críticos são encontrados no Apêndice C. Na apresentação dos resultados faz-se constante referência às variáveis pressão, massa específica e temperatura na forma reduzida, que são definidas respectivamente como  $p_r \equiv p/p_c$ ,  $\rho_r \equiv \rho/\rho_c$  e  $T_r \equiv T/T_c$ , onde  $p_c$ ,  $\rho_c$ ,  $T_c$  se referem ao valor crítico destas variáveis. O valor utilizado para o fator acêntrico nas EOS de RKS e PR é  $\omega = 0.344$ , que corresponde ao valor para a água. Salvo menção em contrário, nas simulações utilizou-se as redes D2V17 para casos bi-dimensionais e a D3V39 para problemas tridimensionais, ambas com uma distribuição de equilíbrio de terceira ordem.

## 7.1 VELOCIDADE DO SOM

### 7.1.1 Solução Analítica

A consequência mais evidente da utilização do operador de colisão em (6.66) é a substituição da equação de estado de gás ideal por uma equação não-ideal desejada. Com a finalidade de verificar que a relação imposta para a pressão é efetivamente incorporada a descrição macroscópica do fluido, analisou-se o comportamento numérico da velocidade do som, uma vez que esta se relaciona com a pressão através da expressão,

$$c_s^2 = \left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T, \quad (7.1)$$

onde emprega-se a derivada à temperatura constante por se tratar de um problema isotérmico.

A equação para a propagação de uma onda em um fluido viscoso decorre da aplicação das equações da continuidade e do balanço da quantidade de movimento, em conjunto com a aproximação de que a amplitude da onda representa uma pequena perturbação no valor da massa específica local. Com base nesta afirmação, o campo de massa específica é representado como a soma da massa específica média do fluido  $\bar{\rho}$  com uma perturbação  $\rho'$  provocado pela presença da onda. Considerando que  $\rho' \ll \bar{\rho}$ , despreza-se termos da ordem de  $\rho' \mathbf{u}$ , uma vez que  $\mathbf{u}$  também pode ser considerada uma perturbação local, o que permite combinar as duas equações na forma

$$\frac{\partial^2 \rho'}{\partial t^2} = c_s^2 \nabla^2 \rho' + \left( 2 - \frac{2}{D} \right) \frac{\mu}{\bar{\rho}} \frac{\partial (\nabla^2 \rho')}{\partial t}. \quad (7.2)$$

sendo que a presença da velocidade do som na expressão anterior se deve a aproximação em série de Taylor da pressão em torno da perturbação  $\rho'$ , ou seja,

$$P(\rho) = P(\bar{\rho}) + \frac{\partial P}{\partial \rho} \bigg|_{\bar{\rho}} \rho' + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2} \bigg|_{\bar{\rho}} \rho'^2 + \dots \approx P(\bar{\rho}) + c_s^2 \rho'.$$

No caso de uma onda plana, a equação em (7.2) pode ser transformada em uma equação diferencial ordinária (EDO) através da aplicação da transformada de Fourier. A solução desta EDO em conjunto com a inversão da transformada resulta na solução geral

$$\rho'(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{-\alpha t} \left[ e^{i(k_x x - \omega t)} + e^{i(k_x x + \omega t)} \right] dk_x, \quad (7.3)$$

onde a variável  $k_x$  é comumente denominada de número de onda e  $\omega$  é a frequência angular, sendo que ambas estão relacionadas pela relação de dispersão

$$\omega = \left[ \sqrt{c_s^2 - \left(2 - \frac{2}{D}\right)^2 \frac{\mu^2 k_x^2}{\bar{\rho}^2 4}} \right] k_x.$$

Nota-se que não há uma relação linear entre  $\omega$  e  $k_x$ , o que resulta em uma dependência da velocidade de fase com o número de onda. Entretanto, o termo responsável por essa relação não linear é negligenciável para valores baixos do número de onda. Altos valores do número de onda não são acessíveis por meio de simulações em razão da discretização espacial, o que permite simplificar a relação de dispersão como

$$\omega = c_s k_x.$$

A presença da viscosidade tem como consequência a dissipação da onda com o tempo, o que é descrito pelo coeficiente de atenuação

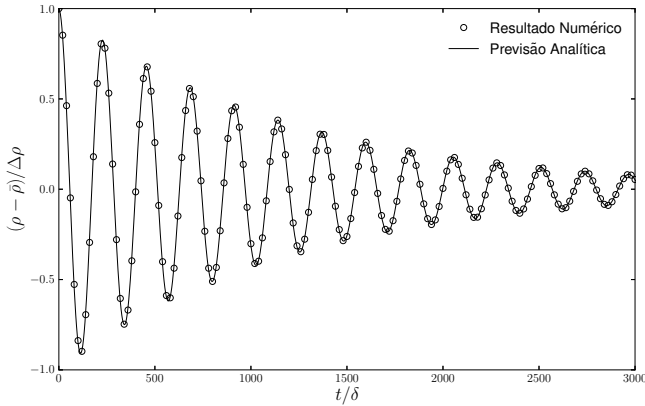
$$\alpha = \frac{1}{2} \left(2 - \frac{2}{D}\right) \frac{\mu}{\bar{\rho}} k_x^2.$$

### 7.1.2 Resultados Numéricos

De forma a estudar o comportamento de um único comprimento de onda, utilizou-se um meio periódico de comprimento  $L$ , no qual a condição inicial é uma perturbação senoidal de comprimento de onda  $L$ , ou seja,  $k_x = 2\pi/L$ . A perturbação inicial dá origem a duas ondas idênticas que viajam em sentidos opostos e que, devido à condição de contorno periódica, se reencontram indefinidamente dando origem a uma onda estacionária. Esta condição inicial utilizada em conjunto com a solução geral na Eq. (7.3) resulta na expressão,

$$\rho'(x, T) = (\Delta\rho)e^{-\alpha t} \sin(kx) \cos(\omega t).$$

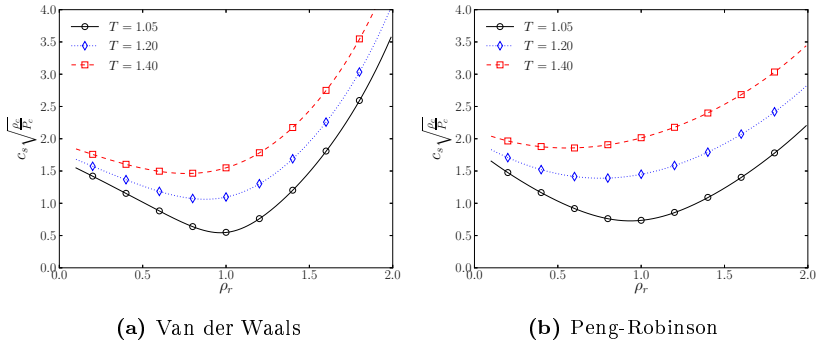
onde  $\Delta\rho$  é a amplitude inicial da perturbação.



**Figura 13:** Evolução temporal da perturbação no antinó da onda estacionária.

A Figura 13 mostra a evolução temporal da perturbação do antinó localizado no ponto  $x = L/4$ , onde foi aplicada a equação de Van der Waals em um meio de  $L = 128h$  com tempo de relaxação  $\tau^* = 0,5$  a uma temperatura  $T_r = 1,1$  e  $\rho_r = 1,1$ . Nota-se uma boa concordância entre a previsão analítica e o resultado numérico, tanto na frequência, que depende da velocidade do som, quanto na atenuação, que por sua vez depende da viscosidade.

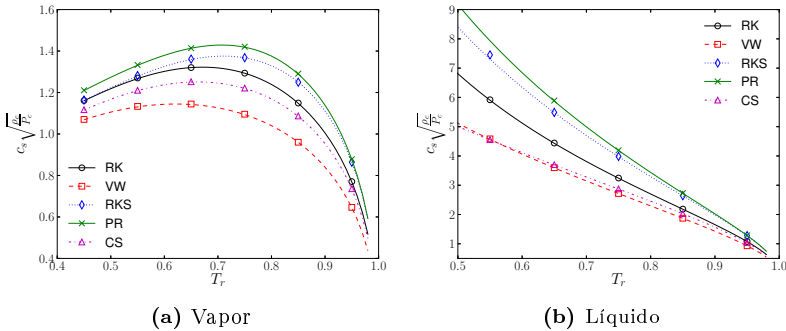
Para o cálculo da velocidade do som foi utilizada a expressão  $c_s = \omega/k_x$ , onde a frequência da onda foi obtida através da Transformada Rápida de Fourier (FFT) aplicada à série temporal para os valores da perturbação no antinó localizado em  $x = L/4$ . A Figura 14 mostra a velocidade do som para as equações de estado de Van der Waals e Peng-Robinson na região acima da temperatura crítica, onde as linhas indicam o resultado analítico, calculado com a relação termodinâmica da Eq. (7.1), enquanto os pontos são os resultados numéricos. Utilizou-se nestes experimentos numéricos uma massa específica crítica adimensional de  $\varrho_c = \rho_c/\rho_0 = 3$  e uma pressão crítica adimensional  $p_c^* = p_c/(\rho_0 h^2/\delta^2) = 0,1$ . Ressalta-se que os valores físicos para os parâmetros críticos dependerão também da atribuição dos valores para  $\rho_0$ ,  $h$  e  $\delta$ . A concordância observada entre resultados simulados e a curva teórica demonstra a efetiva incorporação da EOS no comportamento macroscópico do método. Simulações também foram realizadas para as equações de estado de Redlich-Kwong, Redlich-Kwong-Soave e Carnahan-Starling com resultados similares.



**Figura 14:** Velocidade do som para as equações (a) Van der Waals e (b) Peng-Robinson para temperaturas acima do valor crítico.

Na Figura 15 encontra-se a velocidade do som para temperaturas inferiores ao valor crítico, tanto para a fase líquida quanto para a fase vapor, sendo que a massa específica média utilizada corresponde ao valor de saturação. Assim como na região de  $T_r > 1$ , os resultados condizem com os valores obtidos da expressão analítica para todas as equações de estado analisadas.

Observa-se, entretanto, que o método torna-se instável para baixos valores de  $T_r$ , razão pela qual a curva de Peng-Robinson não apresenta pontos para  $T_r < 0,6$ . Esta instabilidade pode ser explicada pela alta velocidade do som existente na fase líquida a baixas temperaturas. No caso específico da equação de Peng-Robinson, é possível inferir pelo gráfico que para a temperatura de  $T_r \approx 0,5$  corresponde uma velocidade adimensional  $c_s \sqrt{\rho_c/p_c} \approx 8$ , que por sua vez resulta na velocidade do som  $c_s \approx 1,5(h/\delta)$  para os valores de  $p_c^*$  e  $\rho_c$  mencionados anteriormente. Devido ao caráter semi-implícito das LBEs contidas nas Eqs (6.52) e (6.57), a velocidade com que a informação pode se propagar pelo domínio é limitada. No caso da rede D2V17 utilizada nestas simulações, a informação pode transladar no máximo uma distância de três sítios em um passo de tempo, conforme pode ser verificado pela Figura 7. Porém, em decorrência dos menores pesos  $\omega_i$  atribuídos às velocidades de maior módulo, as velocidades menores possuem um papel preponderante na programação da informação no meio discreto, o que reduz o valor dessa velocidade máxima. Como esta instabilidade é inerente a LBE, a simulação da fase líquida em baixas temperaturas só é possível aumentando-se o valor de  $h$  ou reduzindo o passo de tempo  $\delta$ , o que por sua vez modifica o valor das variáveis críticas adimensionais  $p_c^*$  e  $\rho_c$ .



**Figura 15:** Velocidade do som para temperaturas abaixo do ponto crítico nas fases (a) vapor e (b) líquida.

Embora os resultados aqui apresentados decorram da aplicação do termo advectivo de terceira ordem, nenhuma diferença notável foi encontrada em relação a forma de segunda ordem para este problema em particular.

## 7.2 CURVA DE COEXISTÊNCIA E PERFIL DE MASSA ESPECÍFICA

Para as fases líquida e vapor de uma substância pura coexistirem em uma dada temperatura, as leis da termodinâmica impõem, no caso de uma interface plana, a igualdade entre a pressão em cada fase, ou seja,

$$p(\rho_l, T) = p(\rho_v, T) = p_{eq}(T) \quad (7.4)$$

onde  $p_{eq}$  é denominada pressão de saturação. Adicionalmente, é necessário que o potencial químico em ambas as fases sejam idênticos. Ressalta-se que esta última afirmação é equivalente à regra das áreas de Maxwell, apresentada na Eq. (6.47). Esta equivalência pode ser demonstrada a partir da relação termodinâmica para a variação do potencial químico em uma transformação a temperatura constante,  $d\mu = \frac{dp}{\rho}$ , cuja integração resulta em

$$\begin{aligned} \mu_l - \mu_v &= \int_{\mu_v}^{\mu_l} d\mu = \int_{\frac{p_{eq}}{\rho_v}}^{\frac{p_{eq}}{\rho_l}} d\left(\frac{p}{\rho}\right) - \int_{\frac{1}{\rho_v}}^{\frac{1}{\rho_l}} pd\left(\frac{1}{\rho}\right) \\ &= \int_{\rho_v}^{\rho_l} \frac{(p - p_{eq})}{\rho^2} d\rho = 0 \end{aligned} \quad (7.5)$$

As Eqs. (7.4) e (7.5) em conjunto com a equação de estado formam um sistema de equações que possibilita a determinação da chamada curva de coexistência, ou seja, permite o cálculo das massas específicas das fases líquida e vapor para uma determinada temperatura de saturação, assim como o cálculo da pressão de saturação. Logo, por ser uma consequência direta da aplicação das leis da termodinâmica, espera-se que a curva de coexistência seja corretamente descrita pelo modelo numérico, o que por sua vez fornece indícios da consistência termodinâmica do mesmo.

Numericamente, a curva de coexistência é obtida através da simulação do problema de uma interface plana onde a condição inicial é um salto na massa específica com a presença de pequenas perturbações. A Figura 16 mostra tais curvas para a equação de Van der Waals, obtidas utilizando tanto a relação de advecção de segunda ordem, Eq. (6.52), quanto a de terceira ordem, Eq. (6.57). Constata-se através do gráfico que a aplicação da terceira ordem resulta em uma curva de coexistência mais próxima da analítica. Adicionalmente, a

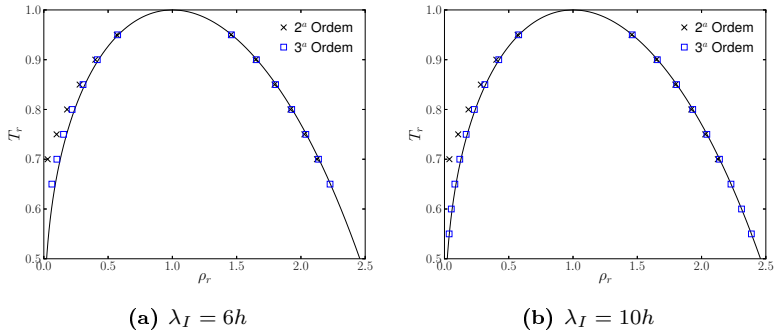
comparação entre as figuras (a) e (b) permite observar que a utilização de um maior número de sítios para representação da interface resulta em uma melhora significativa dos resultados para esta forma discreta. Já o método de segunda ordem possui erros significativos e não é possível observar uma melhora nos resultados decorrentes da utilização de um maior número de sítios para a representação da interface  $\lambda_I$ .

Como demonstrado no capítulo anterior, a equação do balanço de quantidade de movimento obtida da análise de Chapman-Enskog em primeira ordem de Knudsen resulta em um perfil que obedece tanto a igualdade das pressões no interior das duas fases quanto à regra das áreas de Maxwell. Consequentemente, a presença de erros na curva de coexistência indica que tal equação não é corretamente recuperada pelo método discreto. Para a terceira ordem é possível, aparentemente, afirmar que os erros se originam do cálculo das derivadas espaciais, uma vez que é observada uma diminuição destes erros a medida que a variação da massa específica na interface é representada por um número maior de sítios.

Nota-se também que o método torna-se instável à medida que a temperatura diminui e a razão entre as massas específicas líquido-vapor aumenta. Na forma discreta de terceira ordem, o intervalo de estabilidade é ampliado a medida que  $\lambda_I/h$  aumenta. Ou seja, temperaturas mais baixas podem ser simuladas quando uma descrição mais detalhada da interface é empregada. Além de possuir um menor intervalo de estabilidade, a relação de segunda ordem para o termo advectivo não apresenta mudança na estabilidade por meio do refinamento na descrição da região interfacial.

As curvas de coexistência obtidas através da forma discreta de terceira ordem para as diferentes EOS é encontrada na Figura 17. Observa-se em todas as equações uma melhor adequação do resultado numérico em relação à previsão teórica e uma ampliação do intervalo de estabilidade a medida que a resolução da interface aumenta. A utilização da equação de Van der Waals se destaca por apresentar resultados em temperaturas inferiores a  $T_r = 0,6$ . Tal fato ocorre pois a razão entre as massas específicas das fases líquida e vapor obtida da equação de Van der Waals é inferior às obtidas das outras equações de estado para uma mesma temperatura. A Tabela 2 sintetiza os resultados encontrados para as menores temperaturas em que o método é estável, assim como a razão  $\rho_l/\rho_v$  correspondente. Nota-se que, apesar da temperatura mínima depender da equação de estado, a razão  $\rho_l/\rho_v$  máxima é aproximadamente uniforme entre as diferentes equações, o que indica que a estabilidade está ligada com a razão entre as massas





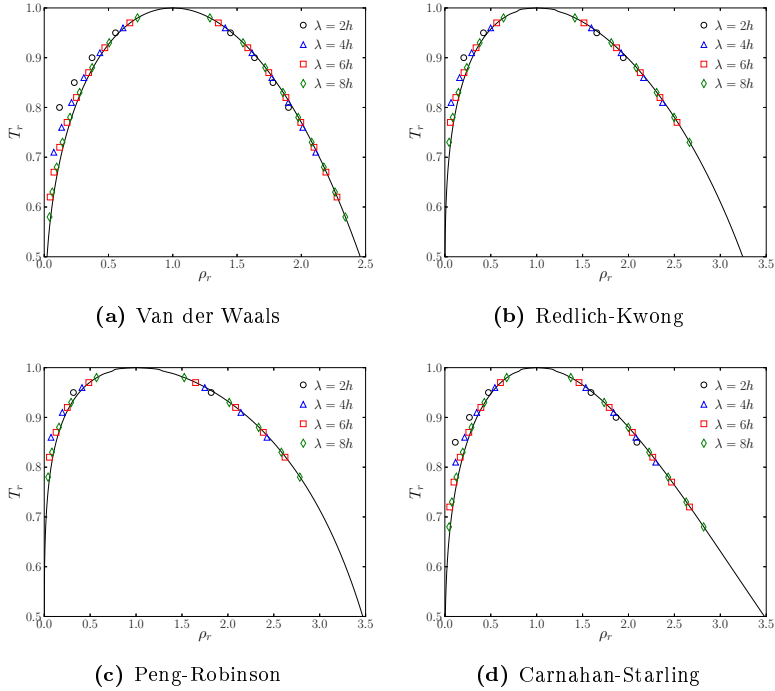
**Figura 16:** Comparação da curva de coexistência para as diferentes ordens do termo advectivo, utilizando a equação de Van de Waals.

específicas. Através da aplicação do modelo, observa-se que mesmo razões de massa específica superiores a 1000 podem ser obtidas, porém tais valores de  $\rho_l/\rho_v$  requerem interfaces da ordem de 30 sítios.

**Tabela 2:** Temperatura relativa mínima e razão máxima entre as massas específicas para qual o método é estável para diferentes equações de estado

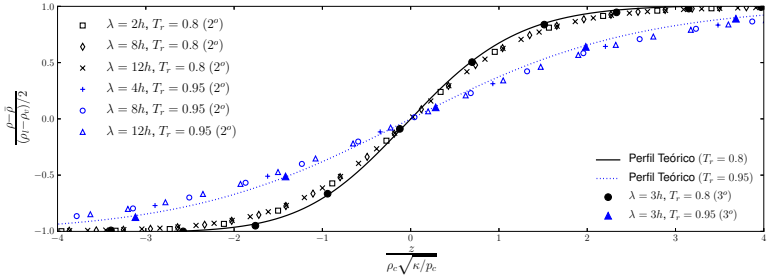
EOS	$\lambda_I/h = 4$		$\lambda_I/h = 8$		$\lambda_I/h = 12$	
	Min $T_r$	Máx $\frac{\rho_l}{\rho_v}$	Min $T_r$	Máx $\frac{\rho_l}{\rho_v}$	Min $T_r$	Máx $\frac{\rho_l}{\rho_v}$
VW	0,687	40,0	0,560	61,9	0,506	78,2
RK	0,800	35,7	0,716	65,7	0,664	90,0
RKS	0,840	36,0	0,766	65,9	0,718	84,2
PR	0,847	39,2	0,776	68,2	0,728	86,1
CS	0,768	34,2	0,670	64,2	0,618	84,2

O perfil de massa específica na região interfacial possui grande influência no resultado dos valores da tensão superficial e das massas específicas das fases, conforme apontado na Seção 6.5. Dentro deste contexto, examinou-se o perfil obtido através de simulações para dife-



**Figura 17:** Comparação das curvas de coexistência para diferentes valores da largura da interface.

rentes temperaturas com ambas as formas de discretização do termo advectivo. Uma comparação entre os resultados é exposta na Figura 18, na qual percebe-se que a discretização de terceira ordem apresenta boa concordância com o resultado teórico mesmo utilizando somente 3 sítios na representação da interface, enquanto a forma de segunda ordem difere visivelmente do perfil previsto mesmo utilizando 12 sítios. Adicionalmente, não é observada uma convergência do perfil numérico de segunda ordem em direção ao perfil analítico, possuindo uma aparente tendência a uma curva diferente daquela obtida em (6.48). Este resultado está em acordo com a conclusão de que a forma discreta de segunda ordem apresenta erros na equação da quantidade de movimento advindos da segunda ordem em Knudsen, o que, consequentemente, modifica a Eq. (6.44) da qual resulta o perfil analítico.

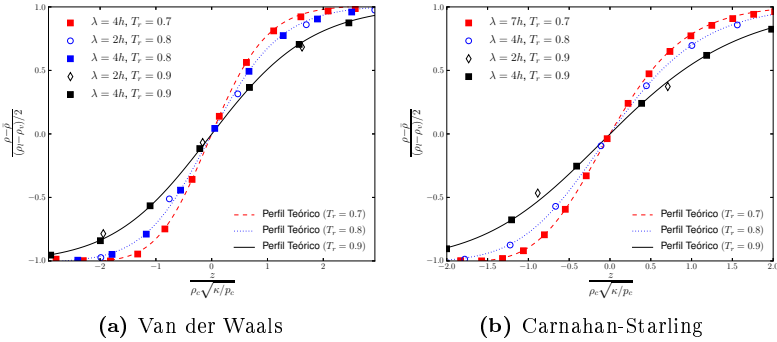


**Figura 18:** Comparação entre os perfis de massas específicas obtidos aplicando o termo de advecção com  $2^a$  e  $3^a$  ordem.

A Figura 19 contém o perfil numérico em diferentes temperaturas para as equações de estado de Van der Waals e Carnahan-Starling utilizando o termo de advecção de terceira ordem. Por meio desta, nota-se que a utilização de dois sítios na representação da interface,  $\lambda_I = 2h$ , resulta em um pequeno erro em relação ao perfil teórico, já utilizando  $\lambda_I = 4h$  não há diferença perceptível entre as curvas analítica e numérica. Tal comportamento do método ao utilizar uma interface delgada é esperado, visto que uma representação com poucos sítios acarreta em erros no cálculo numérico das derivadas espaciais, notadamente no caso do gradiente do laplaciano. Logo, é notável a convergência do resultado com somente 4 sítios ou, conforme a Figura 18, até mesmo 3 sítios na representação da região interfacial. A ausência de resultados para  $\lambda_I = 2h$  para o caso  $T_r = 0.7$  na equação de Van der Waals e para o caso  $T_r = 0,8$  e  $T_r = 0,7$  na equação de Carnahan- Stirling devem-se à instabilidade numérica. Os resultados para outras equações de estado foram omitidos por apresentarem comportamento similar.

### 7.3 LEI DE LAPLACE E TENSÃO SUPERFICIAL

Além de reproduzir corretamente as massas específicas das fases líquida e vapor, em um modelo multifásico espera-se que o papel da interface no escoamento seja corretamente descrito. Logo, é necessário verificar se a interface formada obedece à equação de Young-Laplace, contida em (2.14). Aplicando esta equação ao caso de uma gota bidimensional de forma circular tem-se a expressão:



**Figura 19:** Comparação dos perfis de massa específica analítico e numérico, onde o termo de advecção de terceira ordem foi utilizado.

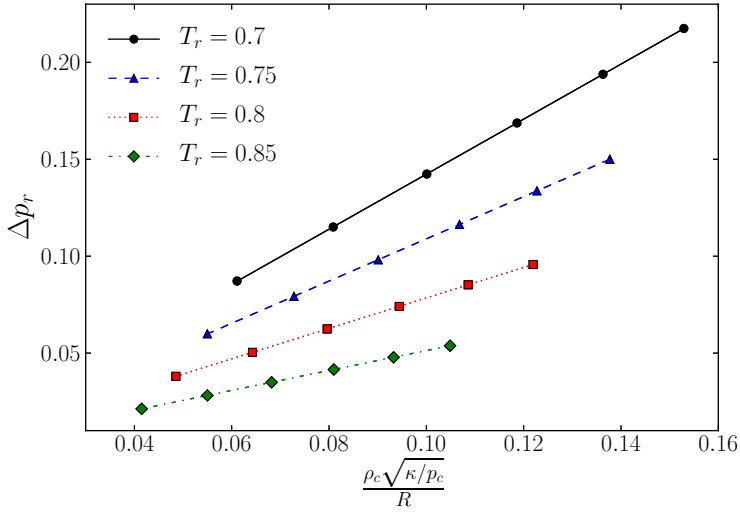
$$p_l - p_v = \frac{\gamma}{R} \quad (7.6)$$

onde  $R$  é o raio da gota. Uma observação importante concerne ao valor utilizado para o raio da gota, que na aplicação do modelo da interface difusa dependerá da escolha da posição da interface. Conforme abordado na Ref. [16], a identificação da tensão superficial como sendo a energia por unidade de área armazenada na interface será válida somente no caso onde não há massa armazenada na mesma. A quantidade de massa por unidade de área armazenada na interface é dada pela expressão

$$\Gamma_i = \frac{1}{A} \int [\rho(\mathbf{x}) - \rho^{l,v}] d\mathbf{x},$$

na qual  $\rho^{l,v}$  assume o valor  $\rho^l$  no interior da fase líquida e  $\rho_v$  na fase vapor e  $A$  é a área da interface. Logo, para que haja compatibilidade com a definição usual de  $\gamma$ , o raio  $R$  utilizado na expressão (7.6) deve ser aquele em que  $\Gamma_i = 0$ .

Utilizando esta condição para aferir o valor de  $R$ , foram realizadas simulações de uma gota bidimensional em equilíbrio com diferentes raios, cujos resultados são apresentados na Figura 20. Na obtenção destes resultados foi utilizada a forma discreta de terceira ordem para o termo advectivo com uma largura da interface  $\lambda_I = 5h$ , onde o valor



**Figura 20:** Verificação da lei de Laplace para diferentes temperatura utilizando uma gota bidimensional com diferentes valores de raio.

do raio da gota se encontra no intervalo de  $10h$  a  $45h$ . A EOS utilizada foi a de Van der Waals. As variáveis nos eixos do gráfico foram convenientemente reescritas com o objetivo de realizar a comparação com o resultado teórico para a tensão superficial, o que pode ser constatado dividindo a lei de Laplace em (7.6) por  $p_c$

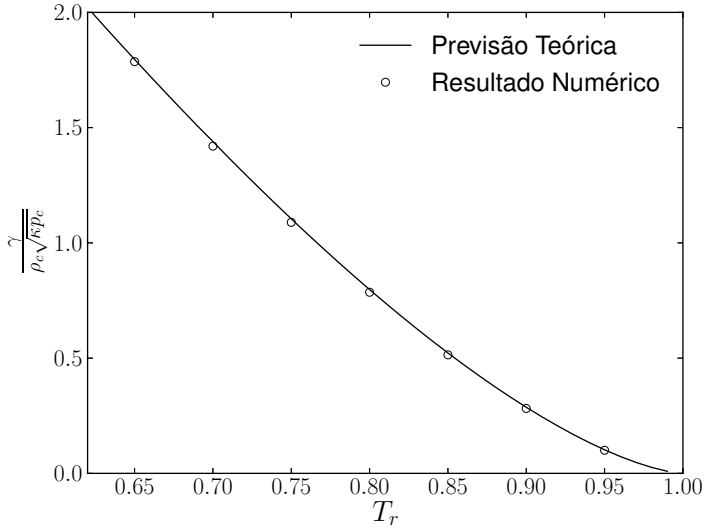
$$\Delta p_r = \left( \frac{\gamma}{\rho_c \sqrt{\kappa p_c}} \right) \frac{\rho_c \sqrt{\kappa/p_c}}{R},$$

onde o termo entre parênteses é um valor adimensional que, segundo a análise da Seção 6.5, é dado pela integral

$$\frac{\gamma}{\rho_c \sqrt{\kappa p_c}} = \int_{\rho_{r,v}}^{\rho_{r,l}} \sqrt{2y_r(\rho_r)} d\rho_r. \quad (7.7)$$

Por meio do referido gráfico observa-se que o modelo segue o comportamento linear esperado entre  $\Delta p$  e  $1/R$ . Em especial, esta relação linear é válida mesmo para valores de raio próximo ao tamanho da interface, uma vez que os maiores valores de  $1/R$  no gráfico correspondem a um

raio próximo a  $10h$ .



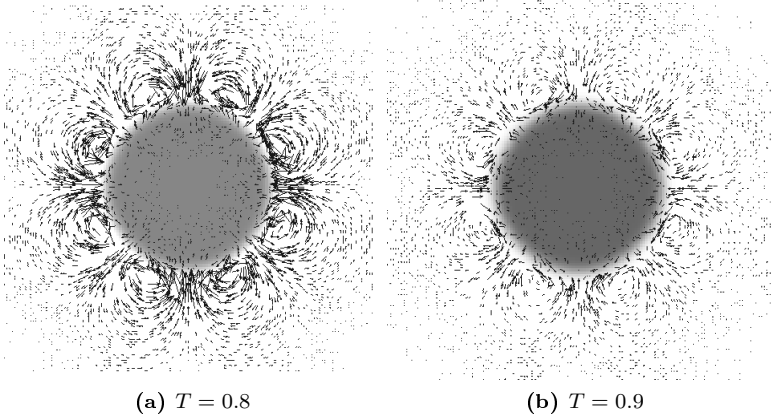
**Figura 21:** Relação entre a temperatura reduzida e a tensão superficial para a equação de Van der Waals obtida utilizando o termo de adveção de terceira ordem com  $\lambda_I = 5h$

Na figura 21 é apresentada uma comparação entre o valor dos coeficientes angulares, obtidos via ajuste linear dos pontos na Figura 20, e a expressão analítica em (7.7). É possível notar que a tensão superficial obtida numericamente está em boa concordância com aquela calculada analiticamente.

## 7.4 CORRENTES ESPÚRIAS

Conforme discutido no Capítulo 5, as correntes espúrias consistem na presença de pequenas velocidades ao redor da interface. Em razão do impacto que estas correntes possam ter em aplicações, apresenta-se aqui uma análise destas velocidades no modelo proposto.

O estudo dessas correntes ocorre usualmente através da análise da velocidade máxima ou da energia cinética média para o problema de uma gota bidimensional estática em um meio periódico. Optou-se neste

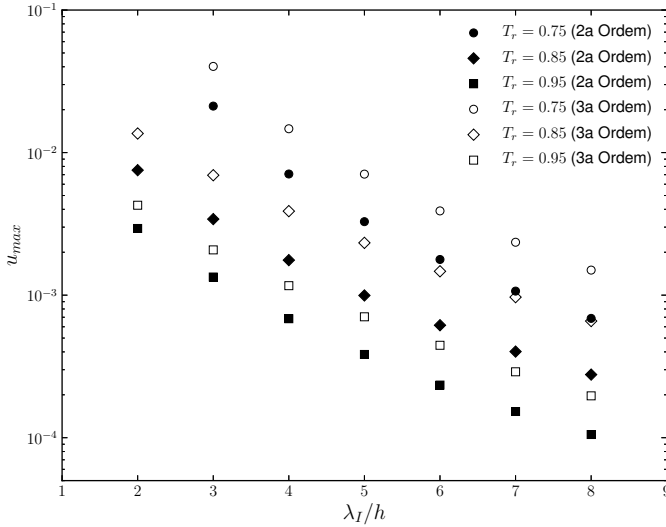


**Figura 22:** Visualização das correntes espúrias em uma gota de raio  $R = 30h$  para  $T_r = 0.8$  e  $T_r = 0.9$  utilizando a equação de Van der Waals. A largura da interface utilizada é  $\lambda_I = 5h$  e a tensão superficial  $\gamma^* = 0.01$ . As velocidades foram multiplicadas pelo fator  $2 \times 10^3$

trabalho pelo uso da velocidade máxima para mensurar este fenômeno já que a medida da energia cinética média é influenciada pelo tamanho do domínio utilizado.

Assim como seus antecessores, o método proposto também apresenta velocidades espúrias ou parasitas próximas à região interfacial. A forma destas correntes espúrias é encontrada na Figura 22, onde observa-se a formação de oito vórtices ao redor da interface, característica semelhante ao observado em outros modelos multifásicos<sup>[49, 50]</sup>, como mostra a Figura 10 para o modelo Shan-Chen.

O gráfico da Figura 23 mostra os resultados para a velocidade máxima em um gota de raio  $R = 30h$  com tensão superficial adimensional  $\gamma^* = \gamma/(\rho_0 h^3 / \delta^2) = 0.01$  com a utilização de ambas formas discretas para o termo advectivo. Nota-se uma diminuição das correntes espúrias com o aumento do número de sítios na representação da interface, o que é esperado, haja vista que uma variação mais suave da interface resulta em erros menores no cálculo do gradiente, laplaciano e gradiente do laplaciano. Observa-se também um aumento das correntes espúrias com a diminuição da temperatura, consequência do aumento da razão entre as massas específicas assim como das forças existentes na



**Figura 23:** Comparação entre as correntes espúrias comparando as formas discretas de segunda e terceira ordem para a advecção

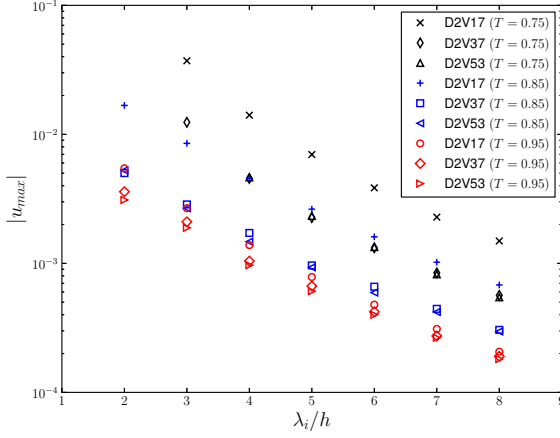
interface. Entretanto, não é constatada uma diminuição do erro com o aumento da ordem no cálculo do termo advectivo. Pelo contrário, observa-se um aumento no emprego da terceira ordem, apesar desta variação estar limitada à mesma ordem de grandeza que a velocidade encontrada no termo advectivo de segunda ordem. Este resultado vem a corroborar o ponto de vista encontrado na literatura<sup>[65]</sup> de que as correntes espúrias tem como causa principal o não balanceamento das forças na interface em decorrência dos erros no cálculo das derivadas espaciais. Adicionalmente, este resultado contradiz a hipótese<sup>[66]</sup> de que a baixa ordem utilizada no termo advectivo é a origem das correntes espúrias.

Investigou-se também as correntes espúrias com a utilização de redes com diferentes ordens de isotropia no cálculo do gradiente e do laplaciano, o que segundo Shan<sup>[49]</sup> reduz as correntes espúrias. Observa-se, por meio da Figura 24a, que há uma redução significativa na velocidade máxima com a utilização da rede D2V37, que possui isotropia de

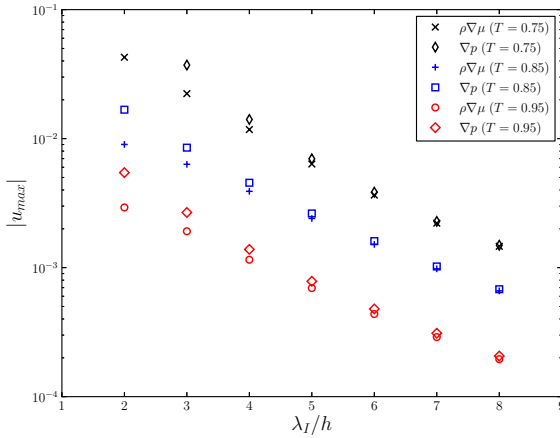


oitava ordem, em relação à rede D2V17, que possui isotropia de sexta ordem, principalmente para as temperaturas reduzidas  $T_r = 0,75$  e  $T_r = 0,85$ . Entretanto, a utilização da rede D2V53<sup>[67]</sup>, com isotropia de décima ordem, apresenta somente uma pequena melhora se comparada à D2V37. Assim como já observado em outros trabalhos<sup>[49]</sup>, a utilização de redes com alta ordem de isotropia acarreta em uma redução destas velocidades junto à interface, entretanto, não há um ganho real na utilização de redes com ordem de isotropia superior a oito.

Outra estratégia encontrada na literatura como forma de redução das correntes espúria é a substituição do gradiente da pressão pelo gradiente do potencial<sup>[47, 50]</sup>, uma vez que em um sistema isotérmico  $\nabla p = \rho \nabla \mu$ . A Figura 24b mostra a velocidade máxima encontrada junto a interface para as duas abordagens. Quando o termo  $\rho \nabla \mu$  é utilizado nota-se uma redução da velocidade, principalmente quando a largura da interface  $\lambda_I/h$  é pequena. Porém, à medida que a interface é representada por um número maior de sítios, os valores de  $|u_{max}|$  para as duas abordagens coincidem.



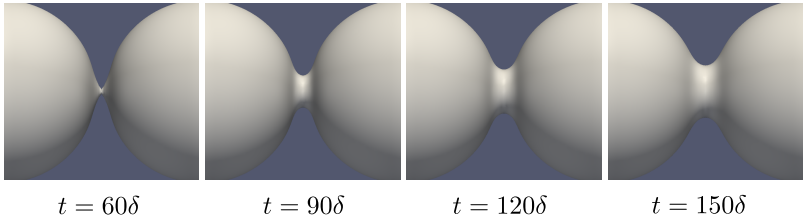
(a) Diferentes Redes

(b) Pressão  $\times$  Potencial Químico

**Figura 24:** Comparação das velocidades espúrias junto à interface (a) utilizando diferentes redes no cálculo do gradiente e laplaciano e (b) substituindo o gradiente da pressão pelo gradiente do potencial químico.

## 7.5 COALESCÊNCIA DE GOTAS

Para demonstrar a aplicabilidade do modelo, nesta seção é abordado o problema da coalescência entre duas gotas. Este fenômeno é caracterizado pela taxa de crescimento da garganta ou ponte formada entre as gotas. Aarts et al.<sup>[68]</sup> assim como Wu, Cubaud e Ho<sup>[69]</sup> realizaram medições do crescimento da garganta utilizando câmeras de alta velocidade, o que permite a comparação dos resultados obtidos via simulação com relações empíricas.



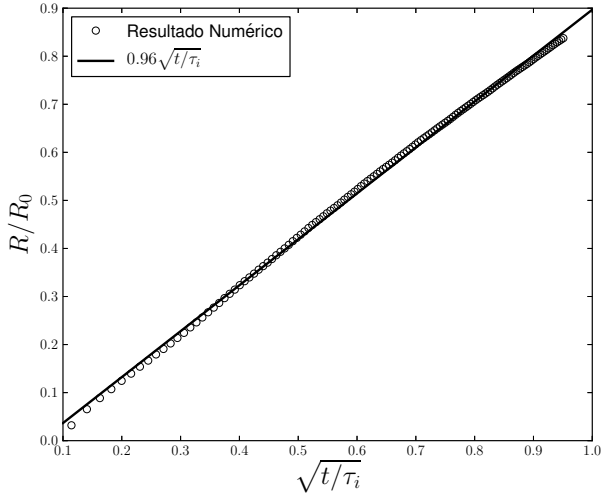
**Figura 25:** Evolução da interface para diferentes passos durante o processo de coalescência.

Segundo Aarts et al.<sup>[68]</sup>, este fenômeno pode ser classificado em dois regimes: o inercial e o viscoso. Através de uma análise de escala é possível argumentar que o regime será determinado pelo valor do número de Reynolds

$$\text{Re} = \frac{\rho\gamma R_0}{\eta^2}$$

onde  $R_0$  é o raio das gotas e a velocidade utilizada no cálculo deste número adimensional é a velocidade capilar dada por  $\gamma/\eta$ . Da análise de escala em conjunto com evidências experimentais, constata-se que para  $\text{Re} < 1$  a velocidade da gota será governada pelas forças viscosas e o raio da garganta cresce linearmente com o tempo, sendo que para  $\text{Re} > 1$ , a inércia tem papel preponderante e um crescimento do raio proporcional a  $t^{1/2}$  é observado.

A simulação foi realizada com a forma discreta de terceira ordem para o termo advectivo em um meio periódico com dimensões  $203 \times 129 \times 129h^3$ . A equação de estado utilizada foi a de Van der Waals com uma temperatura reduzida de 0,8 e uma massa específica crítica  $\varrho_c = 4$ . O raio inicial das gotas utilizado foi  $R_0 = 30h$ , sendo a largura da interface  $\lambda_I/h = 3,5$ , a tensão superficial adimensional  $\gamma^* = 0,27$



**Figura 26:** Crescimento do raio da garganta formada entre as duas gotas durante a coalescência.

e viscosidade adimensional para a fase líquida de  $\eta^* = \varrho_l \tau / a^2 = 1,28$ . Com tais propriedades tem-se um número de Reynolds de  $Re = 19$ , o que caracteriza um regime inercial.

De modo a compatibilizar a descrição com a Ref [68], a variável tempo é adimensionalizada por meio do tempo de coalescência no regime inercial  $\tau_i = \sqrt{\rho_l R_0^3 \gamma}$ . Os resultados para o caso descrito são apresentados na Figura 26, na qual observa-se um crescimento do raio da garganta proporcional a  $t^{1/2}$ , o que está em concordância com as observações experimentais. O ajuste linear da curva  $R/R_0 \times \sqrt{t/\tau_i}$  fornece um coeficiente angular de 0,96. O valor encontrado a partir da análise experimental de Aarts et al.<sup>[68]</sup> é de 1,2, enquanto Wu, Cubaud e Ho<sup>[69]</sup> obteve um coeficiente de 1,09. Embora apresente uma discrepância em relação ao valor experimental, nota-se uma melhor concordância em relação a outros métodos numéricos, notadamente ao método integral de fronteira<sup>[70]</sup> que prevê um valor de 1,62.

## 7.6 CRESCIMENTO DE BOLHA EM MEIO LÍQUIDO

O crescimento de uma bolha em uma meio líquido sujeito a uma pressão abaixo do valor de saturação também foi estudado. Este problema é de especial interesse porque demonstra a versatilidade do modelo, uma vez que neste ocorre a formação espontânea de uma nova fase. Adicionalmente, a taxa de crescimento da bolha pode ser determinada analiticamente<sup>[2]</sup>, o que permite avaliar os resultados obtidos.

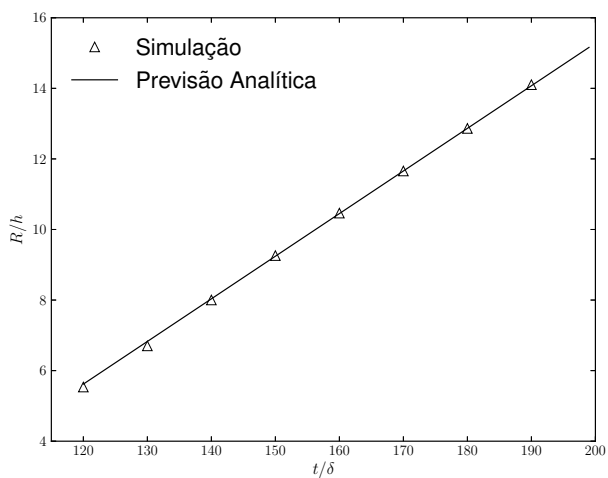
Em uma situação isotérmica, a expansão da bolha é controlada pela inércia, uma vez que o vapor dispõem instantaneamente do calor necessário para a realização da mudança de fase. O tratamento analítico deste regime de crescimento foi estudado pela primeira vez por Rayleigh<sup>[71]</sup>, que, por meio da hipótese de um escoamento incompressível e invíscido para a fase líquida, obteve uma equação para a evolução do raio da bolha,  $R(t)$ , via integração da equação da continuidade e do balanço da quantidade de movimento, na forma

$$R \frac{d^2 R}{dt^2} + \frac{3}{2} \left( \frac{dR}{dt} \right)^2 = \frac{p(\rho_v) - p_\infty}{\rho_l},$$

onde  $p_\infty$  indica a pressão quando  $r \rightarrow \infty$ . Esta equação resulta em uma solução linear na forma

$$R(t) = \left( \frac{2}{3} \left[ \frac{p(\rho_v) - p_\infty}{\rho_l} \right] \right)^{1/2} t. \quad (7.8)$$

A simulação deste fenômeno foi realizada utilizando um meio periódico de dimensões de  $65 \times 65 \times 65$  com a condição inicial de massa específica de  $0,8\rho_l$ . A EOS utilizada foi a de Van der Waals, sendo  $T_r = 0,8$ ,  $\gamma^* = 0,0328$  e  $\lambda_I = 4h$ . Uma pequena perturbação é adicionada na posição central com o objetivo de estimular a formação inicial da bolha. A Figura 27 mostra o resultado de  $R/h$  para a simulação realizada, na qual observa-se um comportamento linear do raio com o tempo, o que está em conformidade com a previsão analítica. Da solução em (7.8), têm-se uma velocidade de crescimento para os parâmetros utilizados de  $0,1207h/\delta$ , enquanto o ajuste linear dos pontos fornece  $0,1226h/\delta$ . Consequentemente, tem-se uma boa concordância entre os resultados teórico e numérico, mesmo levando em consideração que o resultado obtido por Rayleigh desconsidera o efeito da viscosidade, situação que não pode ser tratada com LB pois corresponde a situação em que o tempo de relaxação tende a zero.



**Figura 27:** Crescimento do raio de uma bolha em um meio líquido com pressão abaixo do valor de saturação

## 8 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi desenvolvido um novo modelo computacional para escoamentos multifásicos por meio da aplicação de métodos numéricos à solução de uma equação cinética para fluidos não-ideais. O modelo contínuo foi obtido através da primeira equação da hierarquia BBGKY, na qual a repulsão à curta distância foi substituída pelo operador de colisão da equação de Enskog e a atração a longa distância aproximada por um potencial médio.

Pela aplicação da análise de Chapman-Enskog, verificou-se que as equações macroscópicas estão em conformidade com aquelas do modelo da interface difusa, sendo obtidas expressões integrais para o cálculo da tensão superficial e para o perfil de massa específica na interface em função da EOS utilizada. Também por intermédio da análise multiescala, constatou-se que alguns termos podem ser negligenciados sem comprometer o comportamento macroscópico do modelo. Utilizando tais simplificações obteve-se dois modelos contínuos para fluidos não-ideais, um para o caso isotérmico e outro para o não isotérmico. A formulação discreta para estas equações foi obtida utilizando o método das abscissas prescritas em conjunto com uma nova forma discreta para o termo advectivo. Com o objetivo de obter um modelo termodinamicamente consistente, propôs-se uma nova aproximação numérica com erros da ordem de  $\delta^4$  para este termo, em contraste com o usualmente empregado em LB que possui erros de terceira ordem.

Os resultados demonstraram que o modelo recupera a curva de coexistência obtida pela regra das áreas de Maxwell quando o termo advectivo de terceira ordem é utilizado. Constatou-se que, para esta forma discreta, os erros nas massas específicas de saturação diminuem à medida que a interface é representada por um número maior de sítios, o que não ocorre com a forma usual de segunda ordem. Tais resultados apontam que a inconsistência termodinâmica encontrada em modelos anteriores está diretamente relacionada à baixa ordem empregada na forma discreta do termo advectivo, o que gera termos espúrios de  $\mathcal{O}(\text{Kn}^2)$  na equação de balanço da quantidade de movimento. A análise do perfil de massa específica na região interfacial corrobora tal conclusão, uma vez que este converge rapidamente para o resultado analítico no caso do termo advectivo de terceira ordem, enquanto o perfil para a segunda ordem diverge do resultado esperado. O modelo também demonstrou boa concordância com a Lei de Laplace, sendo que os valores para a tensão superficial concordam com aqueles obtidos pela expressão

analítica da análise multiescala.

Assim como observado em outros modelos LB para múltiplas fases, constatou-se que o modelo torna-se numericamente instável com a diminuição da temperatura. Porém, o aumento do número de sítios que representa a interface amplia significativamente o intervalo de estabilidade do modelo. Adicionalmente, uma análise de estabilidade homogênea não linear<sup>[72]</sup> do termo advectivo de terceira ordem mostra que este é numericamente instável quando o operador BGK é utilizado com  $\tau^* < 1/6$ . Esta condição de estabilidade limita a obtenção de baixos valores de viscosidade, haja visto que este coeficiente de transporte depende linearmente de  $\tau^*$ . Uma forma de contornar tal deficiência é substituir este operador pelo de dois tempos de relaxação proposto por Philippi et al.<sup>[36]</sup>.

Como principal característica negativa do modelo aponta-se a ocorrência de correntes espúrias, cuja ordem de grandeza é similar a outros modelos LB multifásicos. Nota-se que a ordem de grandeza das correntes espúrias diminui linearmente com a resolução da interface, porém a completa eliminação destas velocidades, ou a sua redução ao limite da precisão do ponto flutuante, só é possível utilizando interfaces da ordem de 30 sítios de largura, o que é proibitivo na prática. Como consequência direta da existência destas correntes, tem-se que a utilização do modelo não-isotérmico fica prejudicada, haja visto que a equação da energia envolve explicitamente o divergente e o gradiente do campo de velocidade o que acarreta em um comportamento anômalo da temperatura na região próxima à interface.

Considerando os resultados obtidos no trabalho e na perspectiva de futuras aplicações, cita-se como aspectos que ainda precisam ser explorados:

- o desenvolvimento de um método de cálculo de gradientes que reduza sensivelmente as correntes espúrias, permitindo assim sua aplicação a problemas não isotérmicos;
- a derivação de condições de contorno que permitam ajustar a interação sólido-fluido com o objetivo de controlar a molhabilidade.

Por fim, o trabalho mostra que a obtenção de modelos LB por intermédio de sua conexão com a teoria cinética resulta em uma física macroscópica mais consistente, na qual os erros e a instabilidade numérica estão diretamente relacionados à resolução utilizada.



## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 KIKKINIDES, E. S.; YIOTIS, A. G.; KAINOURGIAKIS, M. E.; STUBOS, A. K. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice Boltzmann methods: Interfacial property issues. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 78, p. 036702, Sep 2008.
- 2 CAREY, V. *Liquid Vapor Phase Change Phenomena: An Introduction to the Thermophysics of Vaporization and Condensation Processes in Heat Transfer Equipment*. [S.l.]: Taylor & Francis, 2007. ISBN 9781591690351.
- 3 WHITESIDES, G. The origins and the future of microfluidics. *Nature*, Nature Publishing Group, v. 442, n. 7101, p. 368–373, 2006.
- 4 Brandes Edward A.; Zhang Guifu; Vivekanandan J. Drop Size Distribution Retrieval with Polarimetric Radar: Model and Application. *Journal of Applied Meteorology*, American Meteorological Society, v. 43, n. 3, p. 461–475, 2004. ISSN 0894-8763.
- 5 KIM, W.; BUSH, J. W. M. Natural drinking strategies. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 705, p. 7–25. ISSN 1469-7645.
- 6 RYU, S.-Y.; KO, S.-H. A comparative study of Lattice Boltzmann and Volume of Fluid Method for Two-Dimensional Multiphase Flows. *Nuclear Engineering and Technology*, Korean Nuclear Society, v. 44, n. 6, 2012.
- 7 PHILIPPI, P. C.; Luiz A. Hegele, J.; dos Santos, L. O. E.; SURMAS, R. From the continuous to the lattice Boltzmann equation: The discretization problem and thermal models. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 73, n. 5, p. 056702, May 2006.
- 8 SHAN, X.; YUAN, X.-F.; CHEN, H. Kinetic theory representation of hydrodynamics: a way beyond the Navier–Stokes equation. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 550, p. 413–441, mar 2006.
- 9 HE, X.; DOOLEN, G. Thermodynamic Foundations of Kinetic Theory and Lattice Boltzmann Models for Multiphase Flows. *Journal of Statistical Physics*, Springer, v. 107, n. 1, p. 309–328, 2002.
- 10 WAGNER, A. J. Thermodynamic consistency of liquid-gas lattice Boltzmann simulations. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 74, p. 056703, Nov 2006.

- 11 KUNDU, P.; COHEN, I. Fluid mechanics. In: \_\_\_\_\_. 4. ed. [S.l.]: Academic Press, 2007. p. 84–120. ISBN 978-0123737359.
- 12 ARIS, R. *Vectors, Tensors and the Basic Equations of Fluid Mechanics*. [S.l.]: Dover Publications, 1990. (Dover Books on Engineering). ISBN 9780486661100.
- 13 JAMET, D. *Diffuse interface models in fluid mechanics*. Disponible em: <<http://pmc.polytechnique.fr/mp/GDR/docu/Jamet.pdf>>.
- 14 BUSH, J. W. M. *Lecture Notes on Surface Tension Module, Lecture 2*. 2004. Department of Mathematics, MIT.
- 15 LEAL, L. Advanced Transport Phenomena: Fluid Mechanics and Convective Transport Processes. In: \_\_\_\_\_. [S.l.]: Cambridge University Press, 2007. (Cambridge Series in Chemical Engineering), p. 65–69.
- 16 ROWLINSON, J.; WIDOM, B. Molecular Theory of Capillarity. In: \_\_\_\_\_. [S.l.]: Dover Publications, 2003. (Dover Books on Chemistry), p. 43–47. ISBN 9780486425443.
- 17 ANDERSON, D.; MCFADDEN, G. A diffuse-interface description of fluid systems. *NIST Int. Rep*, v. 5887, 1996.
- 18 ANDERSON, D.; MCFADDEN, G.; WHEELER, A. Diffuse-interface methods in fluid mechanics. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Annual Reviews, v. 30, p. 139–165, Jan 1998.
- 19 IRVING, J.; KIRKWOOD, J. The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equations of hydrodynamics. *The Journal of Chemical Physics*, v. 18, p. 817, 1950.
- 20 KORTEWEG, D. Sur la forme que prennent les équations du mouvement des fluides si l'on tient compte des forces capillaires causées par des variations de densité considérables mais continues et sur la théorie de la capillarité dans l'hypothèse d'une variation continue de la densité. *Archives Néerlandaises des Sciences exactes et naturelles*, v. 6, n. 1, p. 6, 1901.
- 21 DUNN, J. Interstitial working and a nonclassical continuum thermodynamics. *New perspectives in thermodynamics*, Springer-Verlag, p. 187–222, 1986.
- 22 NADIGA, B. T.; ZALESKI, S. Investigations of a Two-Phase Fluid Model. *Eur. J. Mech. B/Fluids*, v. 15, n. 885, 1996.

- 23 HARRIS, S. *An Introduction to the Theory of the Boltzmann Equation*. [S.l.]: Dover Publications, 1971. ISBN 0-486-43831-7.
- 24 CERCIGNANI, C. Mathematical methods in kinetic theory. In: \_\_\_\_\_. 2nd. ed. [S.l.]: Plenum Press New York, 1990. p. 1–2.
- 25 CHAPMAN, S.; COWLING, T. *The mathematical theory of non-uniform gases: an account of the kinetic theory of viscosity, thermal conduction and diffusion in gases*. 3. ed. [S.l.]: Cambridge university press, 1970.
- 26 BHATNAGAR, P. L.; GROSS, E. P.; KROOK, M. A Model for Collision Processes in Gases. I. Small Amplitude Processes in Charged and Neutral One-Component Systems. *Physical Review*, American Physical Society, v. 94, n. 3, p. 511–525, May 1954.
- 27 REE, F. H.; HOOVER, W. G. Seventh Virial Coefficients for Hard Spheres and Hard Disks. *The Journal of Chemical Physics*, AIP, v. 46, n. 11, p. 4181–4197, 1967.
- 28 FRISCH, U.; HASSLACHER, B.; POMEAU, Y. Lattice-Gas Automata for the Navier-Stokes Equation. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 56, n. 14, p. 1505–1508, Apr 1986.
- 29 MCNAMARA, G. R.; ZANETTI, G. Use of the Boltzmann Equation to Simulate Lattice-Gas Automata. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 61, n. 20, p. 2332–2335, Nov 1988.
- 30 HIGUERA, F.; ZANETTI, G. Boltzmann approach to lattice gas simulations. *Europhysics Letters*, v. 9, n. 663, 1989.
- 31 CHEN, S.; CHEN, H.; MARTNEZ, D.; MATTHAEUS, W. Lattice Boltzmann model for simulation of magnetohydrodynamics. *Physical Review Letters*, American Physical Society, v. 67, n. 27, p. 3776–3779, Dec 1991.
- 32 QIAN, Y. H.; D'HUMIÈRES, D. d.; LALLEMAND, P. Lattice BGK Models for Navier-Stokes Equation. *Europhysics Letters*, v. 17, n. 6, p. 479–484, jan. 1992.
- 33 HE, X.; LUO, L.-S. Theory of the lattice Boltzmann method: From the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical Review E*, American Physical Society, v. 56, n. 6, p. 6811–6817, Dec 1997.

- 34 HE, X.; CHEN, S.; DOOLEN, G. D. A Novel Thermal Model for the Lattice Boltzmann Method in Incompressible Limit. *Journal of Computational Physics*, v. 146, n. CP986057, p. 282–300, October 1998.
- 35 D'HUMIÈRES, D. Multiple-relaxation-time lattice Boltzmann models in three dimensions. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, v. 360, n. 1792, p. 437–451, 2002.
- 36 PHILIPPI, P. C.; L. A. Hegele, J.; SURMAS, R.; SIEBERT, D. N.; dos Santos, L. O. E. From the Boltzmann to the lattice-Boltzmann equation: beyond BGK collision models. *International Journal of Modern Physics C*, 2007.
- 37 SIEBERT, D. N. *Análise de formas discretas da equação de Boltzmann para problemas térmicos bi-dimensionais*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2007.
- 38 SHAN, X. General solution of lattices for Cartesian lattice Bhatnagar-Gross-Krook models. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 81, p. 036702, Mar 2010.
- 39 SIEBERT, D.; HEGELE, L.; SURMAS, R.; Dos Santos, L.; PHILIPPI, P. Thermal Lattice Boltzmann in Two Dimensions. *International Journal of Modern Physics C*, v. 18, n. 04, p. 546–555, 2007.
- 40 SIEBERT, D.; Hegele Jr, L.; PHILIPPI, P. Lattice Boltzmann equation linear stability analysis: Thermal and athermal models. *Physical Review E*, APS, v. 77, n. 2, p. 26707, 2008.
- 41 GUNSTENSEN, A.; ROTHMAN, D.; ZALESKI, S.; ZANETTI, G. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids. *Physical Review A*, APS, v. 43, n. 8, p. 4320–4327, 1991.
- 42 SHAN, X.; CHEN, H. Simulation of nonideal gases and liquid-gas phase transitions by the lattice Boltzmann equation. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 49, p. 2941–2948, Apr 1994.
- 43 SHAN, X.; CHEN, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, APS, v. 47, n. 3, p. 1815–1819, 1993.

- 44 SHAN, X.; DOOLEN, G. Multicomponent lattice-Boltzmann model with interparticle interaction. *Journal of Statistical Physics*, Springer, v. 81, n. 1, p. 379–393, 1995.
- 45 HUANG, H.; KRAFCZYK, M.; LU, X. Forcing term in single-phase and Shan-Chen-type multiphase lattice Boltzmann models. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 84, p. 046710, Oct 2011.
- 46 YUAN, P.; SCHAEFER, L. Equations of state in a lattice Boltzmann model. *Physics of Fluids*, AIP, v. 18, p. 042101, 2006.
- 47 JAMET, D.; TORRES, D.; BRACKBILL, J. On the Theory and Computation of Surface Tension: The Elimination of Parasitic Currents through Energy Conservation in the Second-Gradient Method. *Journal of Computational Physics*, v. 182, n. 1, p. 262–276, 2002.
- 48 GUO, Z.; ZHENG, C.; SHI, B. Force imbalance in lattice Boltzmann equation for two-phase flows. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 83, p. 036707, Mar 2011.
- 49 SHAN, X. Analysis and reduction of the spurious current in a class of multiphase lattice Boltzmann models. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 73, p. 047701, Apr 2006.
- 50 LEE, T.; FISCHER, P. F. Eliminating parasitic currents in the lattice Boltzmann equation method for nonideal gases. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 74, p. 046709, Oct 2006.
- 51 SUKOP, M. C.; HUANG, H.; LIN, C. L.; DEO, M. D.; OH, K.; MILLER, J. D. Distribution of multiphase fluids in porous media: Comparison between lattice Boltzmann modeling and micro-x-ray tomography. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 77, p. 026710, Feb 2008.
- 52 WANG, W.; LIU, Z.; JIN, Y.; CHENG, Y. LBM simulation of droplet formation in micro-channels. *Chemical Engineering Journal*, v. 173, n. 3, p. 828–836, 2011. ISSN 1385-8947.
- 53 SANKARANARAYANAN, K.; SHAN, X.; KEVREKIDIS, I. G.; SUNDARESAN, S. Analysis of drag and virtual mass forces in bubbly suspensions using an implicit formulation of the lattice Boltzmann method. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 452, p. 61–96. ISSN 1469-7645.

- 54 KUPERSHTOKH, A. L.; MEDVEDEV, D. A.; KARPOV, D. I. On equations of state in a lattice Boltzmann method. *Comput. Math. Appl.*, Pergamon Press, Inc., Tarrytown, NY, USA, v. 58, n. 5, p. 965–974, set. 2009. ISSN 0898-1221.
- 55 SBRAGAGLIA, M.; BENZI, R.; BIFERALE, L.; SUCCI, S.; SUGIYAMA, K.; TOSCHI, F. Generalized lattice Boltzmann method with multirange pseudopotential. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 75, p. 026702, Feb 2007.
- 56 SWIFT, M.; ORLANDINI, E.; OSBORN, W.; YEOMANS, J. Lattice Boltzmann simulations of liquid-gas and binary fluid systems. *Physical Review E*, APS, v. 54, n. 5, p. 5041–5052, 1996.
- 57 OSBORN, W. R.; ORLANDINI, E.; SWIFT, M. R.; YEOMANS, J. M.; BANAVAR, J. R. Lattice Boltzmann Study of Hydrodynamic Spinodal Decomposition. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 75, p. 4031–4034, Nov 1995.
- 58 HE, X.; SHAN, X.; DOOLEN, G. D. Discrete Boltzmann equation model for nonideal gases. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 57, p. R13–R16, Jan 1998.
- 59 ZOU, Q.; HE, X. Derivation of the macroscopic continuum equations for multiphase flow. *Phys. Rev. E*, American Physical Society, v. 59, p. 1253–1255, Jan 1999.
- 60 KIRKWOOD, J. G.; BOGGS, E. M. The Radial Distribution Function in Liquids. *The Journal of Chemical Physics*, AIP, v. 10, n. 6, p. 394–402, 1942.
- 61 CERCIGNANI, C. Mathematical methods in kinetic theory. In: \_\_\_\_\_. 2nd. ed. [S.l.]: Plenum Press New York, 1990. p. 110–117.
- 62 ROMERO, I. Notas de aula, *Mecánica del sólido deformable*. 2013. Disponível em: <<http://bigmac.mecaest.etsii.upm.es/Site/MSD.html>>.
- 63 KATZGRABER, H. G.; HASSLER, F. (Ed.). Proseminar in Theoretical Physics: Phase Transitions. 2007. Disponível em: <<http://katzgraber.org/teaching/ss07/files/proseminar.pdf>>.
- 64 SANTOS, L. O. E.; FACIN, P. C.; PHILIPPI, P. C. Lattice-Boltzmann model based on field mediators for immiscible fluids. *Physical Review E*, APS, v. 68, n. 5, p. 056302, 2003.

- 65 WAGNER, A. J. The origin of spurious velocities in lattice Boltzmann. *International Journal of Modern Physics B*, v. 17, n. 01n02, p. 193–196, 2003.
- 66 CRISTEA, A.; SOFONEA, V. Reduction of Spurious Velocity in Finite Difference Lattice Boltzmann Models For Liquid-Vapor Systems. *International Journal of Modern Physics C*, v. 14, n. 09, p. 1251–1266, 2003.
- 67 Hegele Jr, L. *Equação de Boltzmann em Rede para Escoamentos Térmicos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, 2010.
- 68 AARTS, D. G. A. L.; LEKKERKERKER, H. N. W.; GUO, H.; WEGDAM, G. H.; BONN, D. Hydrodynamics of Droplet Coalescence. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 95, p. 164503, Oct 2005.
- 69 WU, M.; CUBAUD, T.; HO, C.-M. Scaling law in liquid drop coalescence driven by surface tension. *Physics of Fluids*, AIP, v. 16, n. 7, p. L51–L54, 2004.
- 70 DUCHEMIN, L.; EGGERS, J.; JOSSERAND, C. Inviscid coalescence of drops. *Journal of Fluid Mechanics*, v. 487, p. 167–178, 2003. ISSN 1469-7645.
- 71 RAYLEIGH, L. VIII. On the pressure developed in a liquid during the collapse of a spherical cavity. *Philosophical Magazine Series 6*, v. 34, n. 200, p. 94–98, 1917.
- 72 WOLF-GRADOW, D. A. Stability Analysis of Lattice Boltzmann Methods. In: \_\_\_\_\_. *Lattice Gas Cellular Automata and Lattice Boltzmann methods: An Introduction*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2000. cap. 5.6.
- 73 STAUDT, P. B. *Nova Equação Cúbica de Estado para a Predição do Equilíbrio Líquido-Vapor de misturas Complexas envolvendo polímeros e óleos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010.





## APÊNDICE A – Polinômios de Hermite



De modo a introduzir os polinômios tensoriais de Hermite, inicialmente define-se a função peso:

$$\omega(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r^2/2}}{(2\pi)^{D/2}}. \quad (\text{A.1})$$

A partir desta função peso, segue a definição dos tensores polinomiais de Hermite utilizada neste trabalho:

$$\mathcal{H}^{(m)}(\mathbf{r}) \equiv \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{r})} \nabla^{(n)}[\omega(\mathbf{r})] = \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{r})} \underbrace{\nabla \nabla \dots \nabla}_{n \text{ vezes}}[\omega(\mathbf{r})] \quad (\text{A.2})$$

Desse modo um elemento qualquer do tensor polinomial de Hermite de ordem  $\mathbf{n}$  é dado por:

$$\mathcal{H}_{\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m}^{(m)}(\mathbf{r}) = \frac{(-1)^n}{\omega(\mathbf{r})} \frac{\partial^m[\omega(\mathbf{r})]}{\partial x_{\alpha_1} \partial x_{\alpha_2} \dots \partial x_{\alpha_m}} \quad (\text{A.3})$$

Através da equação anterior, nota-se que os polinômios tensoriais de Hermite são simétricos por troca de índices. Adicionalmente, estes obedecem a fórmula de recorrência

$$\mathcal{H}^{(m+1)}(\mathbf{r}) = \mathbf{r} \mathcal{H}^{(m)} - \nabla \mathcal{H}^{(m)} \quad (\text{A.4})$$

que segue da definição desses polinômios.

Pode-se demonstrar que estas funções são ortogonais sobre o produto interno:

$$\int \omega(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{s_m}^{(m)}(\mathbf{r}) \mathcal{H}_{l_n}^{(n)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{mn} \delta_{l_n s_m} (n_1! n_2! n_3! \dots n_D!) \quad (\text{A.5})$$

onde  $\delta$  é o delta de Kronicker, sendo que  $\delta_{l_n s_m}$  é 0 caso não exista nenhuma permutação de índices em que os dois conjuntos de índices sejam idênticos e 1 caso exista. As fatoriais no lado direito estão relacionadas com o número de repetições de uma coordenada no conjunto de índices  $\mathbf{l}_n$ , por exemplo,  $\mathbf{n}_1$  é o número de vezes que a coordenada  $\mathbf{x}_1$  aparece em  $\mathbf{l}_n$ .

Se uma função  $\mathbf{f}(\mathbf{r})$  é contínua e de quadrado integrável esta pode ser expandida como

$$f(r) = \omega(r) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a_{s_n}^{(n)} \mathcal{H}_{s_n}^{(n)}(r) \quad (\text{A.6})$$

onde se impõe que os coeficientes  $a_{s_n}^{(n)}$  também sejam simétricos por troca de índices. Desse modo os coeficientes da expansão são dados por:

$$a_{s_n}^{(n)} = \int f(r) \mathcal{H}_{s_n}^{(n)}(r) dr. \quad (\text{A.7})$$

Os polinômios de Hermite para as primeiras ordens têm a seguinte forma:

$$\mathcal{H}^{(0)}(r) = 1, \quad (\text{A.8})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha}^{(1)}(r) = r_{\alpha}, \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta}^{(2)}(r) = r_{\alpha}r_{\beta} - \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathcal{H}_{\alpha\beta\gamma}^{(3)}(r) = r_{\alpha}r_{\beta}r_{\gamma} - (r_{\gamma}\delta_{\alpha\beta} + r_{\alpha}\delta_{\gamma\beta} + r_{\beta}\delta_{\alpha\gamma}). \quad (\text{A.11})$$

## **APÊNDICE B – Redes**



**Tabela 3:** Redes bidimensionais para  $2^a$  (D2Q9),  $3^a$  (D2V17) e  $4^a$  Ordem (D2V37)

$c_i$	D2Q9	D2V17	D2V37
$(0, 0)$	$1/4$	$\frac{575+193\sqrt{193}}{8100}$	$-\frac{2827+5330a^2-3023a^4+432a^8}{432a^8}$
$(\pm 1, 0)$	$1/9$	$\frac{3355-91\sqrt{193}}{18000}$	$\frac{93-174a^2+92a^4}{72a^8}$
$(\pm 1, \pm 1)$	$1/36$	$\frac{655+17\sqrt{193}}{27000}$	$\frac{81-141a^2+76a^4}{144a^8}$
$(\pm 2, 0)$	-	-	$\frac{7}{240a^4}$
$(\pm 2, \pm 1)$	-	-	$-\frac{45-60a^2+16a^4}{360a^8}$
$(\pm 2, \pm 2)$	-	$\frac{685-49\sqrt{193}}{54000}$	$\frac{(-3+a^2)^2}{576a^8}$
$(\pm 3, 0)$	-	$\frac{1445-101\sqrt{193}}{162000}$	$-\frac{5-10a^2+4a^4}{1080a^8}$
$(\pm 3, \pm 1)$	-	-	$\frac{15-15a^2+4a^4}{1440a^8}$
$a^2$	$3$	$\frac{125+5\sqrt{193}}{72}$	$\frac{1}{36} \left[ 49 - \frac{17(7)^{2/3}}{(67+36\sqrt{30})^{1/3}} + (469 + 252\sqrt{30})^{1/3} \right]$

**Tabela 4:** Fator de escala  $a$  e pesos  $w_i$  para as redes tridimensionais de 2<sup>a</sup> Ordem (D3Q15), 3<sup>a</sup> Ordem (D3V39) e 4<sup>a</sup> Ordem (D3V103).

$c_i$	D3Q15	D3V39	D3V103
$(0, 0, 0)$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{3601 - 12031a^2 + 16660a^4 - 10584a^6 + 2592a^8}{2592a^8}$
$(\pm 1, 0, 0)$	$\frac{1}{9}$	$\frac{1}{12}$	$\frac{-21 + 62a^2 - 75a^4 + 36a^6}{48a^8}$
$(\pm 1, \pm 1, \pm 1)$	$\frac{1}{72}$	$\frac{1}{27}$	$\frac{61 - 114a^2 + 72a^4}{384a^8}$
$(\pm 2, 0, 0)$	-	$\frac{2}{135}$	$\frac{195 - 355a^2 + 258a^4 - 72a^6}{960a^8}$
$(\pm 2, \pm 1, 0)$	-	-	$\frac{-1 + a^2}{18a^8}$
$(\pm 2, \pm 2, 0)$	-	$\frac{1}{432}$	$\frac{13 - 7a^2}{1152a^8}$
$(\pm 2, \pm 2, \pm 2)$	-	-	$\frac{-25 - 45a^2 + 18a^4}{3840a^8}$
$(\pm 3, 0, 0)$	-	$\frac{1}{1620}$	$\frac{-85 + 190a^2 - 139a^4 + 36a^6}{6480a^8}$
$(\pm 3, \pm 1, \pm 1)$	-	-	$\frac{7 - 4a^2}{2304a^8}$
$(\pm 3, \pm 3, \pm 3)$	-	-	$\frac{(5 - 4a^2)^2}{103680a^8}$
$a^2$	3	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{36} \left[ 49 - \frac{17(\tau)^{2/3}}{(67 + 36\sqrt{30})^{1/3}} + (469 + 252\sqrt{30})^{1/3} \right]$



## **APÊNDICE C – Equações de Estado**



**Tabela 5:** Fórmulas para as equações de estado<sup>[73]</sup> utilizadas nas simulações.

Sigla	Forma Usual	Forma Reduzida
VW	$p = \frac{\rho RT}{1-\rho b} - a\rho^2$	$p_r = \frac{8\rho_r T_r}{3-\rho_r} - 3\rho_r^2$
RK	$p = \frac{\rho RT}{1-\rho b} - \frac{a\rho^2}{\sqrt{T}(1+b\rho)}$	$p_r = \frac{3\rho_r T_r}{1-B\rho_r} - \frac{\rho_r^2}{\sqrt{T_r}(B+B^2\rho_r)}$
RKS	$p = \frac{\rho RT}{1-\rho b} - \frac{a\alpha_r(T)\rho^2}{1+b\rho}$	$p_r = \frac{\rho_r T_r}{Z(1-B\rho_r)} - \frac{A\alpha_r(T_r)\rho_r^2}{1+B\rho_r}$
PR	$p = \frac{\rho RT}{1-\rho b} - \frac{a\alpha_p(T)\rho^2}{1+2b\rho-b^2\rho^2}$	$p_r = \frac{\rho_r T_r}{Z(1-B\rho_r)} - \frac{A\alpha_p(T_r)\rho_r^2}{1+2B\rho_r-B^2\rho_r^2}$
CS	$p = \rho RT \left[ \frac{1+(\frac{b\rho}{4})+(\frac{b\rho}{4})^2-(\frac{b\rho}{4})^3}{(1-\frac{b\rho}{4})^3} \right] - a\rho^2$	$p_r = \frac{\rho_r T_r}{Z} \left[ \frac{1+\frac{B\rho_r}{4}+(\frac{B\rho_r}{4})^2-(\frac{B\rho_r}{4})^3}{(1-\frac{B\rho_r}{4})^3} \right] - A\rho_r^2$
$\alpha_r(T) = [1 + (0, 48508 + 1, 55171w - 0, 15613w^2)(1 - \sqrt{T_r})]^2$		
$\alpha_p(T) = [1 + (0, 37464 + 1, 54226w - 0, 26992w^2)(1 - \sqrt{T_r})]^2$		

**Tabela 6:** Relação entre os parâmetros das equações de estado e as variáveis no ponto crítico.

Sigla	$B = \rho_c b$	$Z = P_c / (\rho_c R T_c)$	$A = a \rho_c^2 / P_c$
VW	$1/3$	$3/8$	$3$
RK	$2^{1/3} - 1$	$1/3$	$(2^{1/3} - 1)^{-1} T_c^{1/2}$
RKS	$2^{1/3} - 1$	$1/3$	$(2^{1/3} - 1)^{-1}$
PR	0.2530765865	0, 3074013087	4, 838698313
CS	0.5217755368	0, 3589562058	3, 852462257

## **APÊNDICE D – Lista de Publicações**



- SIEBERT, Diogo Nardelli; HEGELE, Luiz Adolfo; Philippi, Paulo César. *Lattice Boltzmann equation linear stability analysis: Thermal and athermal models*. Em: PHYSICAL REVIEW E, Volume 77, Issue 2, Page 026707, 2008.
- PHILIPPI, Paulo Cesar; SANTOS, Luis Orlando Emerich dos; HEGELE, Luiz Adolfo; ORTIZ, Carlos Enrique Pico, SIEBERT, Diogo Nardelli; SURMAS, Rodrigo. *Thermodynamic consistency in deriving lattice Boltzmann models for describing segregation in non-ideal mixtures* Em: PHILOSOPHICAL TRANSACTIONS OF THE ROYAL SOCIETY A, Volume 369, Number 1994, Page 2292, 2011.
- PHILIPPI, Paulo Cesar; MATILLA, Keijo K.; SIEBERT, Diogo Nardelli; SANTOS, Luis Orlando Emerich dos; HEGELE, Luiz Adolfo; SURMAS, Rodrigo. *Lattice-Boltzmann equations for describing segregation in non-ideal mixtures*. Em: JOURNAL OF FLUID MECHANICS, Volume 713, Page 564, 2012.